

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI	ix
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	xii
ABSTRAK	xiii
ABSTRACT	xiv
BAB I. PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Rumusan masalah	2
1.3. Tujuan Penelitian	2
1.4. Manfaat Penelitian	3
1.5. Hipotesis penelitian	3
1.6. Tempat dan Waktu Penelitian	3
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1. Diabetes Melitus	4
2.2. Jenis-Jenis Diabetes	5
2.3. Gejala	6
2.4. Pengobatan	7
2.5. <i>Water Kefir</i>	7
2.6. Enzim α -Glukosidase	8
2.7. Mekanisme Kerja Obat Terhadap Enzim α -Glukosidase	9
2.8. Lipinski Rule of Five	10
2.9. Penambatan Molekul	11
2.9.1 Tahapan Penambatan Molekul	11
2.9.2 Parameter Penambatan Molekul	13
2.10. Validasi Penambatan Molekul	15
2.11. Visualisasi Penambatan Molekul	15

2.12	Simulasi Dinamika Molekul.....	16
2.12.1	Tahapan simulasi dinamika molekul.....	16
2.12.2	Parameter Simulasi Dinamika Molekul	17
2.13	Perangkat Lunak.....	19
BAB III. METODOLOGI PENELITIAN		21
BAB IV PROSEDUR PENELITIAN		22
4.1.	Alat.....	22
4.1.1.	Perangkat Keras	22
4.1.2.	Perangkat Lunak	22
4.2.	Bahan.....	22
4.3.	Prosedur Penelitian.....	22
4.3.1.	Persiapan Ligan.....	22
4.3.2.	Persiapan Protein Target	22
4.3.3.	Skrining Ligan Uji	23
4.3.4.	Optimasi geometri.....	23
4.3.5.	Validasi Prosedur Docking	23
4.3.6.	Penambahan Molekul Senyawa Uji	23
4.3.7.	Analisis Hasil Docking	24
4.3.8.	Visualisasi Dinamika Molekul.....	24
4.3.9.	Dinamika Molekul	24
BAB V. HASIL & PEMBAHASAN		27
5.1	Penyiapan ligan uji	27
5.1.1	Parameter sifat fisikokimia	27
5.2	Validasi penambatan molekul	29
5.3	Penambatan ligan uji	31
5.4	Simulasi dinamika molekul.....	33
5.5	Analisis hasil simulasi dinamika molekul.....	33
BAB 6. KESIMPULAN DAN SARAN.....		39
6.1.	Kesimpulan	39
6.2.	Saran.....	39
DAFTAR PUSTAKA		40
DAFTAR LAMPIRAN		45

DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI

Gambar 2. 1 Mekanisme yang menyebabkan resistensi insulin Diabetes melitus .4	
Gambar 2. 2 Reseptor α -glukosidase9	

DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1 Senyawa Bioaktif pada Water Kefir.....	7
Tabel 5. 1 Sifat Fisikokimia ligan uji	27
Tabel 5. 2 Parameter validasi penambatan molekul.....	29
Tabel 5. 3 Hasil penambatan molekul ligan uji.....	31
Tabel 5. 4 Hasil Perhitungan Energi MMGBSA.....	37

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Daftar Senyawa Uji yang Digunakan Pada Penelitian.....	45
Lampiran 2. Visualisasi 2D dan 3D Interaksi Penambatan Molekul Ligan Uji..	50
Lampiran 3. Analisis pergerakan ligan alami dan ligan uji per-ns.....	55
Lampiran 4. Analisis pergerakan ligan alami dan ligan uji S3 per-ns	56
Lampiran 5. Analisis pergerakan ligan alami dan ligan uji S10 per-ns	57
Lampiran 6. Analisis pergerakan ligan alami dan ligan uji S12 per-ns	58
Lampiran 7. Fluktuasi Residu di Sekitar Atom.....	59
Lampiran 8. MMGBSA.....	61
Lampiran 9. Hasil Visualisasi VMD Docking Senyawa Uji.....	61

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN	NAMA
WHO	<i>World Health Organization</i>
DSV	<i>Discovery Study Visualizer</i>
DM	Diabetes Mellitus
2D	Dua Dimensi
3D	Tiga Dimensi
BM	Berat Molekul
RMSD	<i>Root Mean Square Deviation</i>
RMSF	<i>Root Mean Square Fluctuation</i>
MMGBSA	<i>Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area</i>
PDB	<i>Protein Data Bank</i>
ΔG	Energi Bebas Ikatan
KI	Konstanta Inhibisi
MMFF94	<i>Merck Molecular Force Field 94</i>