

## DAFTAR ISI

	Halaman
<b>HALAMAN JUDUL .....</b>	<b>i</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN KEASLIAN.....</b>	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN.....</b>	<b>iii</b>
<b>KATA PENGANTAR.....</b>	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA ILMIAH .....</b>	<b>v</b>
<b>ABSTRAK .....</b>	<b>vi</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR ISI.....</b>	<b>viii</b>
<b>DAFTAR TABEL .....</b>	<b>xi</b>
<b>DAFTAR GAMBAR.....</b>	<b>xii</b>
<b>DAFTAR RUMUS.....</b>	<b>xiii</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN .....</b>	<b>xiv</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN.....</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan masalah .....	3
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Manfaat Penelitian .....	3
1.4.1 Bagi Peneliti .....	3
1.4.2 Bagi Pembaca.....	3
1.4.3 Bagi Institusi .....	3
1.5 Hipotesa .....	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....</b>	<b>5</b>
2.1 Tanaman <i>Garcinia mangostana</i> L. (Manggis).....	5
2.1.1 Klasifikasi Tanaman Manggis.....	5
2.1.2 Kandungan fitokimia dan manfaat.....	6
2.2 Penyakit Parkinson.....	8
2.3 Terapi Farmakologi Parkinson .....	10
2.4 Catechol-O-Methyltransferase (COMT).....	16
2.5 <i>Studi in-silico</i> .....	17
2.6 Penambatan Molekuler.....	18
2.7 Dinamika Molekuler .....	19
2.8 Kerangka Teori.....	20

2.9	Kerangka Konsep .....	21
<b>BAB III</b>	<b>METODE PENELITIAN .....</b>	<b>22</b>
3.1	Rancangan Penelitian .....	22
3.2	Waktu dan Tempat Penelitian .....	22
3.3	Jenis Data .....	22
3.4	Variabel Penelitian .....	22
3.4.1	Variabel Bebas .....	22
3.4.2	Variabel Terikat .....	22
3.5	Alat dan Bahan .....	22
3.5.1	Alat .....	22
3.5.2	Bahan .....	23
3.6	Definisi Operasional .....	23
3.7	Prosedur Penelitian .....	24
3.7.1	Simulasi Penambatan Molekuler .....	24
3.7.2	Simulasi Dinamika Molekuler .....	25
3.8	Analisis Data .....	29
3.9	Skema Penelitian .....	30
<b>BAB IV</b>	<b>HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>31</b>
4.1	Hasil .....	31
4.1.1	Preparasi Struktur Makromolekul (protein dan ligan alami) .....	31
4.1.2	Preparasi Ligan Uji dan Ligan Pembanding .....	31
4.1.3	Validasi Metode Penambatan Molekuler .....	34
4.1.4	Penambatan Molekuler .....	35
4.1.5	Dinamika Molekuler .....	37
4.2	Pembahasan .....	39
4.2.1	Preparasi Struktur Makromolekul .....	39
4.2.2	Preparasi ligan uji dan ligan pembanding .....	40
4.2.3	Validasi Metode .....	41
4.2.4	Penambatan Molekuler .....	42
4.2.5	Dinamika Molekuler .....	44
<b>BAB V</b>	<b>KESIMPULAN .....</b>	<b>48</b>
5.1	Kesimpulan .....	48
5.2	Saran .....	48
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>		<b>50</b>

LAMPIRAN..... 57



**DAFTAR TABEL**

Tabel 3.1 Definisi Operasional.....	23
Tabel 4.1 Visualisasi struktur 3D ligan hasil preparasi .....	31
Tabel 4.2 Hasil Validasi metode penambatan kembali ligan alami dengan protein (redocking).....	34
Tabel 4.3 Hasil penambatan ligan dengan protein reseptor COMT. ....	35
Tabel 4.4 Nilai rata-rata RMSD dari simulasi dinamika antara ligan dengan protein reseptor COMT.....	37
Tabel 4.5 Nilai RMSF pada residu asam amino kunci dari simulasi dinamika antara ligan dengan protein reseptor COMT .....	38
Tabel 4.6 Perhitungan Energi Bebas ikatan dengan metode MMPBSA dan MMGBSA .....	39

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Tanaman Manggis ( <i>Garcinia mangostana</i> L.) .....	6
Gambar 2.2 Struktur Kimia senyawa turunan xanthone .....	7
Gambar 2.3 Patofisiologi Parkinson .....	8
Gambar 2.4 <i>Body Lewy</i> pada <i>substansia nigra pars compacta</i> .....	9
Gambar 2.5 Terapi Farmakologi Parkinson .....	10
Gambar 4.1 Visualisasi struktur 3D .....	31
Gambar 4.2 Posisi tumpang tindih antara ligan alami sebelum dilakukan penambatan (merah) dan sesudah dilakukan penambatan (biru).....	35
Gambar 4.3 Visualisasi 2D dan 3D interaksi antara ligan alami dengan protein reseptor COMT dilakukan penambatan kembali ( <i>redocking</i> ).....	35
Gambar 4.4 Grafik RMSD dari simulasi dinamika molekuler.....	38
Gambar 4.5 Grafik RMSF dari simulasi dinamika molekuler .....	39

**DAFTAR RUMUS**

Rumus 2.1 *Root Mean Square Deviation* (RMSD)..... 19

**DAFTAR LAMPIRAN**

Lampiran 1. File gridbox dalam format txt (grid.txt).....	57
Lampiran 2. File ion.mdp pada tahap netralisasi .....	58
Lampiran 3. File em.mdp pada tahap minimisasi energi .....	59
Lampiran 4. File NVT.mdp pada tahap ekuilibrasi 1 .....	60
Lampiran 5. File NPT.mdp pada tahap ekuilibrasi 2 .....	62
Lampiran 6. File md.mdp pada tahap produksi.....	64
Lampiran 7. File Masukan MMPBSA.in .....	66
Lampiran 8. File Masukan MMGBSA.in .....	67
Lampiran 9. Hasil visualisasi 2D dan 3D interaksi antara ligan dengan protein reseptor COMT.....	68
Lampiran 10. File Notepad hasil penambatan molekuler (Energi afinitas) .....	72