

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR TABEL.....	vii
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR LAMPIRAN.....	ix
RINGKASAN	x
SUMMARY	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	6
II.1. Penyakit Degeneratif.....	6
II.2. Penyakit Alzheimer.....	7
II.3. Agregasi Protein.....	11
II.4. Protein β -sekretase (BACE1).....	13
II.5. Protein Target: BACE1 (1XS7).....	14
II.6. Biosintesis Punicalagin pada Buah Delima (<i>Punica granatum L.</i>).....	15
II.7. Asam Galagat	17
II.8. Asam Heksahidroksidifenat	18
II.9. Asam Ellagat	18
II.10. Kuersetin	19
II.11. Dinamika Molekul	20
II.12. Analisis Hasil Simulasi Dinamika Molekul.....	22
II.12.1. <i>Root Mean Squared Deviation</i> (RMSD).....	22
II.12.2. Jari-jari Girasi.....	23
II.12.3. Energi Interaksi	23
BAB III METODE PENELITIAN.....	25
III.1 Alat dan Bahan.....	25
III.1.1 Alat.....	25
III.1.2 Bahan	26
III.2 Prosedur Kerja.....	26

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	31
IV.1. Preparasi dan Validasi Struktur 3 Dimensi Protein dan Ligan	32
IV.1.1 Preparasi dan Validasi Struktur 3 Dimensi Protein	32
IV.1.2 Preparasi dan Validasi Struktur Ligan	34
IV.2. Konfirmasi Residu Aktif Interaksi Ligan pada Sisi Pengikatan β - Sekretase	39
IV.3. Minimisasi Energi	41
IV.4. Ekuilibrase	43
IV.5. Analisis Hasil Simulasi Dinamika Molekul Selama 50 ns: Kestabilan Konformasi Kompleks Protein-Ligan	44
IV. 5.1. RMSD Protein	44
IV. 5.2. RMSD Ligan	47
IV. 5.3. Jari-jari Girasi	49
IV.6. Analisis Hasil Simulasi Dinamika Molekul Selama 50 ns: Kekuatan Interaksi Kompleks Protein-Ligan	50
IV.6.1. Energi Interaksi	51
IV.6.2. Residu dan Gugus Penentu Interaksi	53
BAB V PENUTUP	60
V.1. Kesimpulan	60
V.2. Saran	61
DAFTAR PUSTAKA	62
LAMPIRAN	67