

## DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	i
KATA PENGANTAR .....	ii
DAFTAR ISI.....	iv
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR .....	vii
DAFTAR LAMPIRAN.....	viii
ABSTRAK .....	ix
ABSTRACT.....	x
BAB I PENDAHULUAN.....	1
I.1 Latar Belakang .....	1
I.2 Tujuan Penelitian .....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	4
II.1 Penyakit Degeneratif .....	4
II.2 Glikasi.....	4
II.2.1 Reaksi Glikasi .....	5
II.2.2 Pembukaan Cincin Glukosa .....	6
II.3 <i>Human Serum Albumine</i> (HSA) .....	7
II.3.1 LK199C dan AK195Q .....	9
II.4 Mekanika Kuantum .....	9
II.5 <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	11
II.6 Optimasi Struktur Geometri.....	12
II.7 <i>Time Dependent Density Functional Theory</i> (TDDFT) .....	13
II.8 <i>Highest Occupied Molecular Orbital</i> (HOMO) dan <i>Lowest Unoccupied Molecular Orbital</i> (LUMO) .....	15
II.9 Spektroskopi UV/Vis.....	16
II.10 Ikatan Hidrogen.....	17
II.11 Energi Interaksi.....	18
BAB III METODE PENELITIAN.....	19
III.1 Waktu dan Tempat Penelitian .....	19
III.2 Alat dan Bahan .....	19

III.2.1 Alat.....	19
III.2.1 Bahan .....	19
III.3 Variabel Penelitian .....	20
III.3.1 Variabel Tetap .....	20
III.3.2 Variabel Berubah.....	20
III.3.3 Variabel Terukur .....	20
III.4 Prosedur Penelitian.....	20
III.4.1 Molecular Docking .....	20
III.4.2 Optimasi dan Perhitungan dengan <i>density functional theory</i> (DFT) ..	21
III.4.3 Perhitungan <i>Time-Dependent Density Functional Theory</i> (TDDFT) ..	22
III.4.4 Perhitungan Orbital Molekul .....	22
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....	23
IV.1 <i>Molecular Docking</i> HSA dengan Glukosa dan Fruktosa.....	23
IV.2 Optimasi Geometri dengan Mekanika Kuantum.....	25
IV.2.1 Optimasi Geometri Kompleks LK199C dengan Glukosa dan Fruktosa .....	27
IV.2.2 Optimasi Geometri Kompleks AK195Q dengan Glukosa dan Fruktosa .....	30
IV.3 Spektrum UV/Vis LK199C dan AK195Q dengan Glukosa dan Fruktosa	33
IV.4 Orbital Molekul LK199C dan AK195Q dengan Glukosa dan Fruktosa...	35
BAB V PENUTUP.....	39
V.1 Kesimpulan.....	39
V.2 Saran .....	39
DAFTAR PUSTAKA .....	40
LAMPIRAN.....	44