

## DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
KATA PENGANTAR .....	iii
ABSTRAK .....	iv
ABSTRACT .....	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR GAMBAR .....	viii
DAFTAR TABEL .....	ix
DAFTAR LAMPIRAN.....	x
I. PENDAHULUAN .....	1
1.1. Latar Belakang.....	1
1.2. Rumusan Masalah .....	4
1.3. Tujuan Penelitian .....	4
1.4. Manfaat Penelitian .....	5
II. TINJAUAN PUSTAKA.....	6
2.1. Diabetes Melitus .....	6
2.2. Enzim <i>Pancreatic <math>\alpha</math>-Amylase</i> .....	9
2.3. Temulawak ( <i>Curcuma xanthorrhiza</i> ) .....	12
2.4. <i>Molecular Docking</i> .....	15
2.4.1. <i>Lipinski's Rule of Five</i> (Ro5).....	16
2.4.2. Prediksi Toksisitas.....	17
2.4.3. Konstanta Inhibisi.....	18
2.5. Hipotesis .....	19
III. METODE PENELITIAN .....	20
3.1. Waktu dan Tempat.....	20
3.2. Alat dan Bahan.....	20
3.2.1. Alat .....	20
3.2.2. Bahan .....	20
3.3. Rancangan Penelitian.....	21
3.4. Cara Kerja .....	22
3.4.1. Preparasi Struktur Reseptor dan Ligan.....	22
3.4.2. Validasi <i>Molecular Docking</i> .....	23
3.4.3. Prediksi Bioavailabilitas Ligan.....	23
3.4.4. Prediksi Toksisitas Ligan .....	24
3.4.5. <i>Virtual Screening</i> .....	24
3.4.6. <i>Molecular Docking</i> .....	25
3.4.7. Visualisasi 2D dan 3D .....	25
3.4.8. Analisis Data .....	26
3.5. Skema Penelitian .....	27
IV. HASIL DAN PEMBAHASAN .....	28
4.1. Reseptor dan Ligan .....	28
4.2. Validasi <i>Molecular Docking</i> .....	30
4.3. Prediksi Bioavailabilitas Ligan.....	31
4.4. Prediksi Toksisitas Ligan.....	36

4.5. <i>Virtual Screening</i> .....	39
4.6. <i>Molecular Docking</i> .....	40
4.7. Interaksi Ligan dengan Residu Asam Amino .....	41
4.8. Konstanta Inhibisi .....	50
4.9. Identifikasi Senyawa Aktif dengan Potensi Inhibisi Terbaik .....	52
V. KESIMPULAN .....	55
5.1. Kesimpulan .....	55
5.2. Saran .....	55
DAFTAR PUSTAKA .....	57
UCAPAN TERIMAKASIH.....	65
LAMPIRAN.....	67
DAFTAR RIWAYAT HIDUP.....	79