

## DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
KATA PENGANTAR .....	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR GAMBAR .....	vii
DAFTAR TABEL.....	viii
DAFTAR LAMPIRAN.....	ix
ABSTRAK .....	x
ABSTRACT.....	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    Agregasi Protein.....	7
II.3    Bovine Serum Albumin (BSA).....	9
II.4    Molecular Dynamics (MD).....	11
II.5    GROMACS .....	12
II.6    Analisis Hasil Dinamika Molekular.....	13
II.7    Aggrescan 3D 2.0.....	16
BAB III METODE PENELITIAN.....	18
III.1    Waktu dan Tempat Penelitian .....	18
III.2    Alat dan Bahan.....	18
III.3    Prosedur Penelitian.....	20
BAB IV PEMBAHASAN.....	22
IV.1    Simulasi Dinamika Molekular II.....	22
IV.2    Analisis Hasil .....	24
IV.3    Analisis Aggrescan 3D.....	38
IV.4    Kaitan antara Sisi Pengikatan dengan Kestabilan Konformasi, Kekuatan Interaksi, dan Potensi Anti Agregasi .....	42
BAB V KESIMPULAN.....	46

V.1	Kesimpulan .....	46
V.2	Saran.....	46
DAFTAR PUSTAKA .....		47
LAMPIRAN.....		55

## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar II. 1</b> Mekanisme Singkat Pembentukan Amiloid .....	8
<b>Gambar II. 2</b> Struktur 3 Dimensi Bovine Serum Albumin (BSA) (PDB ID: 3V03) .....	10
<b>Gambar IV. 1</b> Profil RMSD bioaktif (a) sampel 50 ns dan (b) sampel 100 ns selama simulasi 50 ns.....	25
<b>Gambar IV. 2</b> Profil RMSD protein (a) sampel 50 ns dan (b) sampel 100 ns selama simulasi 50 ns.....	28
<b>Gambar IV. 3</b> Profil jari-jari girasi (a) sampel 50 ns dan (b) sampel 100 ns selama simulasi 50 ns.....	32
<b>Gambar IV. 4</b> Visualisasi pola kluster sisi pengikatan semua bioaktif di semua protein .....	43

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel IV. 1</b> Nilai rata-rata RMSD bioaktif .....	26
<b>Tabel IV. 2</b> Nilai Rata-Rata RMSD Protein.....	29
<b>Tabel IV. 3</b> Nilai Rata-Rata Jari-Jari Girasi .....	32
<b>Tabel IV. 4</b> Nilai Rata-Rata Energi Interaksi Elektrostatik Kompleks .....	34
<b>Tabel IV. 5</b> Nilai Rata-Rata Energi Interaksi Van der Waals Kompleks.....	36
<b>Tabel IV. 6</b> Nilai Rata-Rata Energi Interaksi Total Kompleks .....	37
<b>Tabel IV. 7</b> Total Score Aggrescan3D .....	38
<b>Tabel IV. 8</b> Total Aggrescan Score Residu-Residu Non-Polar yang Terekspos ke Permukaan Protein .....	40
<b>Tabel IV. 9</b> Data bioaktif di setiap kluster .....	43

## DAFTAR LAMPIRAN

<b>Lampiran 1.</b> Skema Kerja.....	55
<b>Lampiran 2.</b> Informasi bioaktif .....	64
<b>Lampiran 3.</b> Profil RMSD protein yang disusun per-protein.....	65
<b>Lampiran 4.</b> Profil RMSD bioaktif yang disusun per-protein.....	66
<b>Lampiran 5.</b> Diagram batang hasil analisis .....	67
<b>Lampiran 6.</b> Visualisasi interaksi bioaktif pada sisi pengikatan BSA .....	68
<b>Lampiran 7.</b> Residu aktif di binding site .....	74
<b>Lampiran 8.</b> Grafik Aggrescan3D .....	75
<b>Lampiran 9.</b> Tabel jumlah peringkat .....	76
<b>Lampiran 10.</b> Visualisasi klasterisasi .....	77
<b>Lampiran 11.</b> Visualisasi Rongga pada setiap kluster .....	79
<b>Lampiran 12.</b> Visualisasi rongga semua bioaktif di protein masing-masing .....	80
<b>Lampiran 13.</b> Data kaitan sisi pengikatan dengan nilai RMSD, energi interaksi dan anti agregasi.....	82