



vi

III.2.2 Dinamika Molekuler	21
III.2.2.1 Persiapan simulasi dinamika molekuler	21
III.2.2.2 Simulasi dinamika molekuler kurkumin dalam air	22
III.2.2.3 Simulasi dinamika molekuler analog kurkumin dalam air	22
III.2.2.4 Simulasi dinamika molekuler kompleks ligan kurkumin dengan reseptor DPP-4	22
III.2.2.5 Simulasi dinamika molekuler kompleks ligan analog kurkumin dengan reseptor DPP-4	23
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	24
IV.1 <i>Docking</i> Molekuler	24
IV.1.1 <i>Docking</i> molekuler Anagliptin dengan DPP-4 sebagai validasi	24
IV.1.2 <i>Docking</i> molekuler kurkumin dan analognya dengan DPP-4	27
IV.2 Simulasi dinamika molekuler	34
IV.2.1 Kurkumin dalam air	34
IV.2.2 Senyawa analog B kurkumin	37
IV.2.3 Sistem kompleks kurkumin – DPP-4 dalam air	38
IV.2.4 Sistem kompleks Senyawa B analog kurkumin – DPP-4 dalam air	41
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	45
V.1 Kesimpulan	45
V.2 Saran	45
DAFTAR PUSTAKA	47
LAMPIRAN	50