

 [Dashboard](#)

 [Explore SINTA](#)

 [Mutation History](#)

 [List Verificator PT](#)

 [My SINTA](#)

 [Covid-19](#)

DETAIL DOCUMENT

Research

Detail Research

Verified by at 0000-00-00 00:00:00

NIDN Leader
0506087901

Leader Name
ENADE PERDANA ISTYASTONO



PDDIKTI Code PT (Leader)
051012

Institution (Leader)
Universitas Sanata Dharma

Title
Desain dan Penemuan Inhibitor Enzim Matrix Metalloproteinase 9 dari Bahan Alam untuk Terapi Luka Diabetes Menggunakan Pendekatan Kimia Medisinal Komputasi

Skema Abbreviation
PD

Skema Name
Penelitian Dasar

The First year of the proposal
Tahun Pertama Usulan
2019

Proposed Year of Activities
Tahun Usulan Kegiatan
2019

The Year of The Activity
Tahun Pelaksanaan Kegiatan
2021

Duration of activity
Lama Kegiatan
3 Year

Proposal Status
didanai

Funds are approved
Rp. 221.425.000,-

SINTA Afiliasi ID
422

Funds Institution
Universitas Sanata Dharma ✓ in sync with Sinta Affiliation

Target TKT
TKT 2

Hibah Program
Penelitian Kompetitif Nasional

Focus Area
Kesehatan

Fund Source Category
Pemerintah

Fund Source

Country Fund Source
ID

- Research Member

ENADE PERDANA ISTYASTONO

Registered in Sinta using **ENADE PERDANA ISTYASTONO** (Sinta ID : 31032)

Status : Leader (Leader) | Universitas Sanata Dharma
- SRI HARTATI YULIANI

Registered in Sinta using **SRI HARTATI YULIANI** (Sinta ID : 5977336)

Status : Member (Member 1) | Universitas Sanata Dharma
- MICHAEL RAHARJA GANI

Registered in Sinta using **MICHAEL RAHARJA GANI** (Sinta ID : 6696295)

Status : Member (Member 2) | Universitas Sanata Dharma

PROTEKSI ISI LAPORAN AKHIR PENELITIAN

Dilarang menyalin, menyimpan, memperbanyak sebagian atau seluruh isi laporan ini dalam bentuk apapun kecuali oleh peneliti dan pengelola administrasi penelitian

LAPORAN AKHIR PENELITIAN MULTI TAHUN

ID Proposal: 3a3cdc36-ad73-4e86-bf60-952d17e376c3
Laporan Akhir Penelitian: tahun ke-1 dari 3 tahun

1. IDENTITAS PENELITIAN

A. JUDUL PENELITIAN

Desain dan Penemuan Inhibitor Enzim Matrix Metalloproteinase 9 dari Bahan Alam untuk Terapi Luka Diabetes Menggunakan Pendekatan Kimia Medisinal Komputasi

B. BIDANG, TEMA, TOPIK, DAN RUMPUN BIDANG ILMU

Bidang Fokus RIRN / Bidang Unggulan Perguruan Tinggi	Tema	Topik (jika ada)	Rumpun Bidang Ilmu
Kesehatan	Teknologi kemandirian bahan baku obat	Bahan baku obat kimia	Analisis Farmasi dan Kimia Medisinal

C. KATEGORI, SKEMA, SBK, TARGET TKT DAN LAMA PENELITIAN

Kategori (Kompetitif Nasional/ Desentralisasi/ Penugasan)	Skema Penelitian	Strata (Dasar/ Terapan/ Pengembangan)	SBK (Dasar, Terapan, Pengembangan)	Target Akhir TKT	Lama Penelitian (Tahun)
Penelitian Kompetitif Nasional	Penelitian Dasar	SBK Riset Dasar	SBK Riset Dasar	2	3

2. IDENTITAS PENGUSUL

Nama, Peran	Perguruan Tinggi/ Institusi	Program Studi/ Bagian	Bidang Tugas	ID Sinta	H-Index
ENADE PERDANA ISTYASTONO Ketua Pengusul	Universitas Sanata Dharma	Farmasi		31032	10
Dr SRI HARTATI YULIANI S.Si, Apt, M.Si Anggota Pengusul 1	Universitas Sanata Dharma	Farmasi	Formulasi hidrogel dan uji in vivo senyawa kandidat hasil uji in silico dan in vitro.	5977336	5
MICHAEL RAHARJA GANI S.Si, Apt, M.Farm Anggota Pengusul 2	Universitas Sanata Dharma	Farmasi	Uji in vitro senyawa-senyawa terpilih hasil penapisan virtual.	6696295	1

3. MITRA KERJASAMA PENELITIAN (JIKA ADA)

Pelaksanaan penelitian dapat melibatkan mitra kerjasama, yaitu mitra kerjasama dalam melaksanakan penelitian, mitra sebagai calon pengguna hasil penelitian, atau mitra investor

Mitra	Nama Mitra
-------	------------

4. LUARAN DAN TARGET CAPAIAN

Luaran Wajib

Tahun Luaran	Jenis Luaran	Status target capaian (<i>accepted, published, terdaftar atau granted, atau status lainnya</i>)	Keterangan (<i>url dan nama jurnal, penerbit, url paten, keterangan sejenis lainnya</i>)
1	Buku referensi	Terbit ber ISBN	Sanata Dharma University Press (anggota Asosiasi Penerbit Perguruan Tinggi Indonesia)

Luaran Tambahan

Tahun Luaran	Jenis Luaran	Status target capaian (<i>accepted, published, terdaftar atau granted, atau status lainnya</i>)	Keterangan (<i>url dan nama jurnal, penerbit, url paten, keterangan sejenis lainnya</i>)
--------------	--------------	---	--

5. ANGGARAN

Rencana anggaran biaya penelitian mengacu pada PMK yang berlaku dengan besaran minimum dan maksimum sebagaimana diatur pada buku Panduan Penelitian dan Pengabdian kepada Masyarakat Edisi 12.

Total RAB 3 Tahun Rp. 755,505,000

Tahun 1 Total Rp. 228,825,000

Jenis Pembelanjaan	Komponen	Item	Satuan	Vol.	Biaya Satuan	Total
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	MMP-9 Inhibitor Screening Kit (Fluorometric)	unit	4	16,000,000	64,000,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Caffeic Acid (kemurnian 98%)	gram	5	1,500,000	7,500,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Ekstrak etanol kopi robusta	gram	5	500,000	2,500,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Ekstrak etanol tempe terstandar genistein	gram	5	1,500,000	7,500,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Ekstrak etanol binahong	gram	5	500,000	2,500,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Genistein	miligram	5	1,413,000	7,065,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Etanol p.a.	L	25	400,000	10,000,000
Bahan	Bahan	Lisensi software	tahun	1	20,000,000	20,000,000

Jenis Pembelanjaan	Komponen	Item	Satuan	Vol.	Biaya Satuan	Total
	Penelitian (Habis Pakai)	YASARA Stucture dari YASARA GmbH Austria selama 1 tahun				
Pengumpulan Data	FGD persiapan penelitian	Koordinasi awal penelitian dengan menghadirkan pakar terkait	paket	1	10,000,000	10,000,000
Pengumpulan Data	Tiket	Yogyakarta-Surabaya pp	OK	2	2,000,000	4,000,000
Pengumpulan Data	Uang Harian	Anggota 2 di Lab. NPMRD Universitas Airlangga	OH	14	140,000	1,960,000
Pengumpulan Data	Penginapan	Pengujian ke Lab. NPMRD Universitas Airlangga	hari	14	500,000	7,000,000
Sewa Peralatan	Peralatan penelitian	Laboratorium Pengujian (meliputi juga peminjaman alat dan pemakaian bahan habis pakai standar laboratorium pengujian in vitro)	bulan	4	1,500,000	6,000,000
Sewa Peralatan	Peralatan penelitian	Laboratorium Virtual untuk Kontruksi, Validasi dan Optimasi PVBS (Virtual Private Server GOLD) dari CV. RumahWeb Indonesia	bulan	12	2,400,000	28,800,000
Analisis Data	Biaya konsumsi rapat	Rapat Koordinasi Bulanan	paket	10	2,000,000	20,000,000
Pelaporan, Luaran Wajib, dan Luaran Tambahan	Biaya penyusunan buku termasuk book chapter	Mengacu PMK 86 2017	unit	1	30,000,000	30,000,000

Tahun 2 Total Rp. 303,220,000

Jenis Pembelanjaan	Komponen	Item	Satuan	Vol.	Biaya Satuan	Total
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	MMP-9 Inhibitor Screening Kit (Fluorometric)	unit	5	16,000,000	80,000,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Caffeic Acid (kemurnian 98%)	gram	5	1,500,000	7,500,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Perpanjangan lisensi software YASARA Stucture dari YASARA GmbH Austria selama 1 tahun	tahun	1	10,000,000	10,000,000
Bahan	Bahan	Bahan dan peralatan	paket	2	5,000,000	10,000,000

Jenis Pembelanjaan	Komponen	Item	Satuan	Vol.	Biaya Satuan	Total
	Penelitian (Habis Pakai)	untuk uji in vivo penyembuhan luka diabetes pada tikus				
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Inhibitor potensial MMP-9 hasil Penapisan Virtual tahun ke-1	senyawa	25	3,000,000	75,000,000
Pengumpulan Data	FGD persiapan penelitian	Penyusunan dan pengurusan Ethical Clearance untuk uji in vivo	paket	1	10,000,000	10,000,000
Pengumpulan Data	Tiket	Yogyakarta-Surabaya pp	OK	4	2,000,000	8,000,000
Pengumpulan Data	Uang Harian	Anggota 2 di Lab. NPMRD Universitas Airlangga	OH	28	140,000	3,920,000
Pengumpulan Data	Penginapan	Anggota 2 di Lab. NPMRD Universitas Airlangga	OH	28	500,000	14,000,000
Sewa Peralatan	Peralatan penelitian	Laboratorium Pengujian (meliputi juga peminjaman alat dan pemakaian bahan habis pakai standar laboratorium pengujian in vitro)	bulan	4	1,500,000	6,000,000
Sewa Peralatan	Peralatan penelitian	Laboratorium Virtual untuk Kontruksi, Validasi dan Optimasi PVBS (Virtual Private Server GOLD) dari CV. RumahWeb Indonesia	bulan	12	2,400,000	28,800,000
Pelaporan, Luaran Wajib, dan Luaran Tambahan	Publikasi artikel di Jurnal Internasional	Di jurnal SCOPUS Q1 Molecules	paket	1	50,000,000	50,000,000

Tahun 3 Total Rp. 223,460,000

Jenis Pembelanjaan	Komponen	Item	Satuan	Vol.	Biaya Satuan	Total
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Bahan dan peralatan untuk uji in vivo penyembuhan luka diabetes pada tikus	paket	5	5,000,000	25,000,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Caffeic Acid (kemurnian 98%)	gram	5	1,500,000	7,500,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Inhibitor potensial MMP-9 terpilih hasil uji in vitro tahun ke-2 untuk diuji in vivo di	senyawa	3	10,000,000	30,000,000

Jenis Pembelanjaan	Komponen	Item	Satuan	Vol.	Biaya Satuan	Total
		tahun ke-3				
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	Bahan uji imunohistokimia untuk melihat aktivitas penyembuhan luka diabetes	paket	5	10,000,000	50,000,000
Bahan	Bahan Penelitian (Habis Pakai)	MMP-9 Inhibitor Screening Kit (Fluorometric) untuk IC50 3 senyawa terpilih	unit	3	16,000,000	48,000,000
Pengumpulan Data	Tiket	Yogyakarta-Surabaya pp	OK	2	2,000,000	4,000,000
Pengumpulan Data	Uang Harian	Anggota 2 di Lab. NPMRD Universitas Airlangga	OH	14	140,000	1,960,000
Pengumpulan Data	Penginapan	Anggota 2 di Lab. NPMRD Universitas Airlangga	hari	14	500,000	7,000,000
Pelaporan, Luaran Wajib, dan Luaran Tambahan	Publikasi artikel di Jurnal Internasional	Publikasi di Jurnal Internasional IJC (Scopus Q3)	paket	1	50,000,000	50,000,000

6. HASIL PENELITIAN

A. RINGKASAN: Tuliskan secara ringkas latar belakang penelitian, tujuan dan tahapan metode penelitian, luaran yang ditargetkan, serta uraian TKT penelitian.

Penderita diabetes berusia 20-79 tahun secara global pada tahun 2013 mencapai 382 juta orang, dan diprediksi akan melebihi 500 juta orang pada tahun 2035. Indonesia masuk 10 besar dalam jumlah penderita diabetes tersebut dengan 8,5 juta orang di tahun 2013 yang diprediksi menjadi 14,1 juta orang di tahun 2035 dengan salah satu komplikasi mayor berupa diabetic foot ulcers (DFU). Prevalensi DFU bagi penderita diabetes di Indonesia mencapai 24%. Komplikasi DFU ini belum ada obatnya dan secara signifikan menurunkan kualitas hidup penderitanya. Salah satu strategi yang diusulkan dalam beberapa tinjauan literatur akhir-akhir ini untuk terapi DFU adalah penemuan inhibitor bagi enzim penghambat penyembuhan luka diabetes matrix metalloproteinase 9 (MMP-9).

Penelitian ini menggunakan pendekatan kimia medisinal komputasi yang diverifikasi secara in vitro dan in vivo untuk menemukan senyawa bahan alam sebagai inhibitor MMP-9. Diawali dengan pembuatan koleksi senyawa-senyawa inhibitor MMP-9 yang memiliki nilai $IC_{50} \leq 1$ mikromolar dari literatur dan ditambah senyawa-senyawa pengalih (decoys) dari Directory of Useful Decoys, Enhanced (DUDE) sebagai sarana validasi retrospektif. Dilanjutkan dengan pengembangan dan validasi protokol Penapisan Virtual Berbasis Struktur (PVBS) yang memanfaatkan teknik-teknik kimia medisinal komputasi dan bantuan perkembangan kecerdasan artifisial. Protokol PVBS tervalidasi tersebut digunakan untuk menapis basis data puluhan ribu senyawa alam dari ZINC15 dan dipilih 10-15 senyawa terprediksi aktif untuk dilanjutkan verifikasi secara in vitro. Tiga senyawa paling poten berdasar hasil uji in vitro dilanjutkan ke uji in vivo dan dilakukan pelacakan literatur untuk memperoleh sumber bahan alam yang menghasilkan senyawa tersebut.

Tujuan penelitian ini adalah diperoleh senyawa bahan alam yang poten sebagai inhibitor MMP-9. Luaran tahun pertama, kedua, dan ketiga secara berturut-turut adalah buku ber-ISBN (tentang DFU, MMP-9 dan fitur-fitur senyawa inhibitor MMP-9), artikel di jurnal bereputasi internasional Molecules (tentang pengembangan dan validasi PVBS dengan target MMP-9), dan artikel di jurnal bereputasi internasional Indonesian Journal of Chemistry (tentang uji in vitro dan uji in vivo senyawa kandidat uji pra klinik). Target TKT penelitian ini adalah 2 yaitu ditemukan beberapa senyawa kandidat uji pre klinik yang sudah terbukti secara in vitro maupun in vivo sebagai inhibitor MMP-9.

Pada tahun pertama penelitian ini sudah berhasil dikonstruksi basis data berisi senyawa aktif dan pengalih untuk validasi retrospektif protokol PVBS yang akan dikembangkan. Simulasi dinamika molekul untuk preparasi target virtual sudah selesai dilakukan. Ekstrak ampas kopi terstandar asam kafeat yang akan digunakan sebagai kontrol positif sudah berhasil dibuat dan divalidasi penetapan kadar asam kafeat di dalamnya. Hasil-hasil penelitian ini sudah dipublikasikan berupa buku referensi ber-ISBN.

B. KATA KUNCI: Tuliskan maksimal 5 kata kunci.

diabetes; penyembuhan luka; metaloproteinase matriks 9; penapisan virtual; bahan alam

Pengisian poin C sampai dengan poin H mengikuti template berikut dan tidak dibatasi jumlah kata atau halaman namun disarankan ringkas mungkin. Dilarang menghapus/memodifikasi template ataupun menghapus penjelasan di setiap poin.

C. HASIL PELAKSANAAN PENELITIAN: Tuliskan secara ringkas hasil pelaksanaan penelitian yang telah dicapai sesuai tahun pelaksanaan penelitian. Penyajian dapat berupa data, hasil analisis, dan capaian luaran (wajib dan atau tambahan). Seluruh hasil atau capaian yang dilaporkan harus berkaitan dengan tahapan pelaksanaan penelitian sebagaimana direncanakan pada proposal. Penyajian data dapat berupa gambar, tabel, grafik, dan sejenisnya, serta analisis didukung dengan sumber pustaka primer yang relevan dan terkini.

Pengisian poin C sampai dengan poin H mengikuti template berikut dan tidak dibatasi jumlah kata atau halaman namun disarankan ringkas mungkin. Dilarang menghapus/modifikasi template ataupun menghapus penjelasan di setiap poin.

C. HASIL PELAKSANAAN PENELITIAN: Tuliskan secara ringkas hasil pelaksanaan penelitian yang telah dicapai sesuai tahun pelaksanaan penelitian. Penyajian dapat berupa data, hasil analisis, dan capaian luaran (wajib dan atau tambahan). Seluruh hasil atau capaian yang dilaporkan harus berkaitan dengan tahapan pelaksanaan penelitian sebagaimana direncanakan pada proposal. Penyajian data dapat berupa gambar, tabel, grafik, dan sejenisnya, serta analisis didukung dengan sumber pustaka primer yang relevan dan terkini.

Penelitian tahun pertama dilaksanakan sesuai rencana. Basis data untuk validasi retrospektif protokol penapisan virtual berbasis struktur (PVBS) bertargetkan metaloproteinase matriks 9 (MMP9) sudah dikonstruksi dengan mengompilasi senyawa aktif dari ChEMBL [1] dan pengalih dari DUDE [2]. Target virtual berhasil dikonstruksi dengan pemodelan molekul dan simulasi dinamika molekul senyawa asam kafeat pada kantung ikatan MMP9 menggunakan YASARA-Structure [3]. Di lain pihak, pembuatan ekstrak ampas kopi terstandar asam kafeat sebagai kontrol positif juga sudah berhasil dilaksanakan dan kadar asam kafeat pada ekstrak tersebut berhasil ditetapkan [4]. Hasil-hasil ini dibukukan dan diterbitkan sebagai buku nasional ber-ISBN, yang dapat diakses pada <https://people.usd.ac.id/~enade/unduh/secangkir-kopi-dan-penemuan-obat-diabetes.pdf>.

D. STATUS LUARAN: Tuliskan jenis, identitas dan status ketercapaian setiap luaran wajib dan luaran tambahan (jika ada) yang dijanjikan pada tahun pelaksanaan penelitian. Jenis luaran dapat berupa publikasi, perolehan kekayaan intelektual, hasil pengujian atau luaran lainnya yang telah dijanjikan pada proposal. Uraian status luaran harus didukung dengan bukti kemajuan ketercapaian luaran sesuai dengan luaran yang dijanjikan. Lengkapi isian jenis luaran yang dijanjikan serta unggah bukti dokumen ketercapaian luaran wajib dan luaran tambahan melalui Simlitabmas mengikuti format sebagaimana terlihat pada bagian isian luaran

Luaran yang dijanjikan di tahun pertama adalah Buku Nasional ber-ISBN dan sudah terpenuhi dengan diterbitkan buku hasil penelitian tahun pertama ini berjudul SECANGKIR KOPI DAN PENEMUAN OBAT DIABETES: STUDI DINAMIKA MOLEKUL dengan ISBN 978-623-6103-23-4.

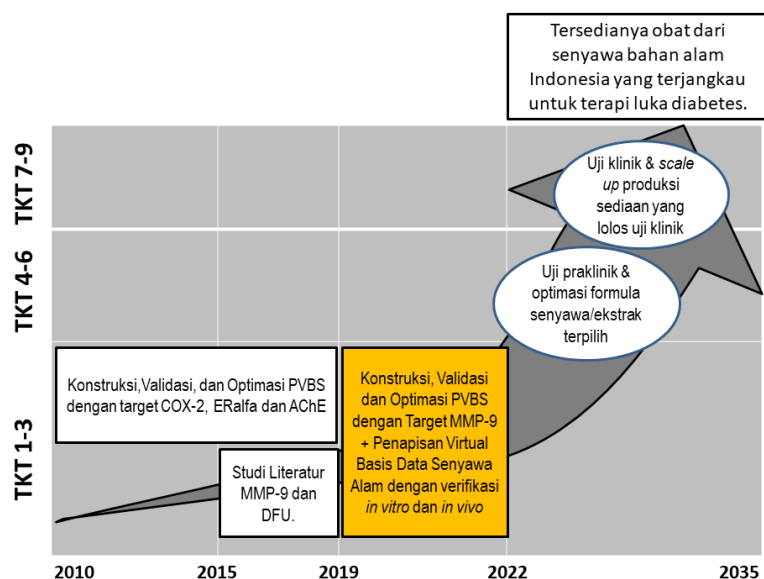
E. PERAN MITRA: Tuliskan realisasi kerjasama dan kontribusi Mitra baik *in-kind* maupun *in-cash* (jika ada). Bukti pendukung realisasi kerjasama dan realisasi kontribusi mitra dilaporkan sesuai dengan kondisi yang sebenarnya. Bukti dokumen realisasi kerjasama dengan Mitra diunggah melalui Simlitabmas mengikuti format sebagaimana terlihat pada bagian isian mitra

Penelitian ini tidak memiliki mitra.

F. KENDALA PELAKSANAAN PENELITIAN: Tuliskan kesulitan atau hambatan yang dihadapi selama melakukan penelitian dan mencapai luaran yang dijanjikan, termasuk penjelasan jika pelaksanaan penelitian dan luaran penelitian tidak sesuai dengan yang direncanakan atau dijanjikan.

Tidak ditemukan kendala yang mengganggu jalannya penelitian.

G. RENCANA TINDAK LANJUT PENELITIAN: Tuliskan dan uraikan rencana tindak lanjut penelitian selanjutnya dengan melihat hasil penelitian yang telah diperoleh. Jika ada target yang belum diselesaikan pada akhir tahun pelaksanaan penelitian, pada bagian ini dapat dituliskan rencana penyelesaian target yang belum tercapai tersebut.



Gambar 1. Peta jalan penelitian yang diusulkan. Bagian yang berlatar belakang kuning merupakan penelitian yang diusulkan

Penelitian ini dilanjutkan pada tahun ke-2 dengan PVBS pada basis data senyawa bahan alam ZINC15 yang terkatagori di Sigma-Aldrich (Ketua Peneliti sebagai PIC). Sejumlah 25 senyawa hit dilanjutkan verifikasi menggunakan uji *in vitro* (Anggota 2 sebagai PIC). Secara paralel dilakukan validasi metode uji *in vivo* menggunakan asam kafeat sebagai kontrol positif dan ekstrak binahong sebagai senyawa uji (Anggota 1 sebagai PIC). *Ethical clearance* diajukan dan diperoleh terlebih dahulu sebelum uji *in vivo* dilakukan. Uji *in vivo* penyembuhan luka dilakukan pada tikus normal dan tikus diabetes. Sejumlah tiga senyawa terpilih hasil uji *in vitro* diformulasi ke bentuk hidrogel untuk dilakukan uji *in vivo* (Anggota 1 sebagai PIC). Kontrol positif yang digunakan adalah asam kafeat.

H. DAFTAR PUSTAKA: Penyusunan Daftar Pustaka berdasarkan sistem nomor sesuai dengan urutan pengutipan. Hanya pustaka yang disitasi pada laporan akhir yang dicantumkan dalam Daftar Pustaka.

1. Bento AP, Gaulton A, Hersey A, Bellis LJ, Chambers J, Davies M, Krüger FA, Light Y, Mak L, McGlinchey S, Nowotka M, Papadatos G, Santos R, Overington JP (2014) The ChEMBL bioactivity database: An update. *Nucl Acids Res* 42:1083–1090 . doi: 10.1093/nar/gkt1031
2. Mysinger MM, Carchia M, Irwin JJ, Shoichet BK (2012) Directory of Useful Decoys, Enhanced (DUD-E): Better Ligands and Decoys for Better Benchmarking. *J Med Chem* 55:6582–6594 . doi: 10.1021/jm300687e
3. Istyastono EP (2020) Studi Dinamika Molekul Stabilisasi Metaloproteinase Matriks 9 oleh Asam Kafeat. *J Farm Galen (Galenika J Pharmacy)* 6:280–285 . doi: 10.22487/j24428744.2020.v6.i2.15131
4. Gani MR, Istyastono EP (2021) Determination of caffeic acid concentration in ethanolic extract of spent coffee grounds. *Indones J Chem* 21:1281–1286 . doi: 10.22146/ijc.61462

Dokumen pendukung luaran Wajib #1

Luaran dijanjikan: Buku referensi

Target: Terbit ber ISBN

Dicapai: Terbit

Dokumen wajib diunggah:

1. Buku ajar meliputi cover, lembar yg memuat ISBN dan daftar isi
- 2.

Surat keterangan terbit dari penerbit dengan menyebutkan jumlah eksemplar yang dice tak

Dokumen sudah diunggah:

1. Buku ajar meliputi cover, lembar yg memuat ISBN dan daftar isi
- 2.

Surat keterangan terbit dari penerbit dengan menyebutkan jumlah eksemplar yang dice tak

Dokumen belum diunggah:

- Sudah lengkap

**SECANGKIR KOPI
DAN
PENEMUAN OBAT DIABETES:
STUDI DINAMIKA MOLEKUL**

Enade Perdana Istyastono



Sanata Dharma University Press

SECANGKIR KOPI DAN PENEMUAN OBAT DIABETES: STUDI DINAMIKA MOLEKUL

Copyright © 2021

Enade Perdana Istyastono
Fakultas Farmasi Universitas Sanata Dharma

Penulis

Enade Perdana Istyastono

Buku elektronik e-Book:
ISBN 978-623-6103-23-4 (PDF)
EAN 9-786236-103234

Cetakan Pertama, November 2021
xvi+109 hlm.; 15,5 x 23 cm.

Ilustrasi Sampul & Tata Letak
Thoms

PENERBIT:



SANATA DHARMA UNIVERSITY PRESS
Lantai 1 Gedung Perpustakaan USD
Jl. Affandi (Gejayan) Mrican,
Yogyakarta 55281
Telp. (0274) 513301, 515253;
Ext.1527/1513; Fax (0274) 562383
e-mail: publisher@usd.ac.id

BUKU HASIL PENELITIAN UNTUK PENGAYAAN
DI BIDANG KIMIA MEDISINAL PADA KHUSUSNYA
DAN ILMU HAYATI PADA UMUMNYA



Sanata Dharma University Press anggota APPTI
(Afiliasi Penerbit Perguruan Tinggi Indonesia)
No. Anggota APPTI: 003.028.1.03.2018

Hak Cipta Dilindungi Undang-Undang.

Dilarang memperbanyak karya tulis ini dalam bentuk dan dengan cara apa pun, termasuk fotokopi, tanpa izin tertulis dari penulis & penerbit.

Isi buku sepenuhnya menjadi tanggungjawab penulis.

Kata Pengantar

Puji syukur dipanjatkan kepada Tuhan atas terbitnya buku “Secangkir Kopi Untuk Diabetes: Studi Dinamika Molekul”. Buku ini ditulis sebagai salah satu luaran Program Penelitian Dasar berjudul “Desain dan Penemuan Inhibitor Enzim Matrix Metalloproteinase 9 dari Bahan Alam untuk Terapi Luka Diabetes Menggunakan Pendekatan Kimia Medisinal Komputasi” yang didanai oleh Direktorat Riset dan Pengabdian Masyarakat, Badan Riset Inovasi Nasional, Republik Indonesia pada tahun 2021-2023. Terima kasih juga disampaikan kepada pihak-pihak yang terlibat baik secara langsung maupun tidak langsung sejak awal penulisan hingga terbitnya buku ini.

Buku ini menjadi sarana berbagi hal-hal praktis untuk melaksanakan riset dinamika molekul guna menyediakan target virtual untuk penemuan dan rancangan obat berbasis struktur. Buku ini disampaikan secara naratif sebagai komplemen dari publikasi-publikasi ilmiah yang terkait. Sebelum membaca buku ini, pembaca disarankan membaca buku “Rancangan Obat dan Penapisan Virtual Berbasis Struktur” dengan ISBN:978-602-5607-52-3 dan “Rancangan Obat Berbantuan Komputer: Peptida Rantai Pendek Sebagai Antikolinesterase” dengan ISBN:978-623-7379-20-1.

Buku ini ditulis selain sebagai luaran penelitian dasar juga sebagai komplemen dari publikasi-publikasi ilmiah dari penelitian-penelitian terkait. Buku ini ditulis dengan sudut pandang orang pertama dengan maksud berbagi pengalaman ilmiah maupun faktor-faktor eksternal dalam penelitian-penelitian terkait yang sulit tersampaikan

pada forum maupun jurnal-jurnal ilmiah. Buku ini diharapkan memperkaya khasanah disiplin ilmu Kimia Medisinal di Indonesia. Kritik dan saran untuk perbaikan sungguh diharapkan untuk perbaikan buku ini dan juga pembelajaran kimia medisinal pada khususnya maupun ilmu hayati pada umumnya. Semoga buku ini bermanfaat bagi pembaca dan juga bagi perkembangan ilmu.

Yogyakarta, Juni 2021

Penulis



“Untuk Meine Sieben
yang selalu berada di antara enam dan delapan”



Daftar Isi

Kata Pengantar	iii
Daftar Isi	vii
Daftar Tabel dan Gambar	ix
Daftar Singkatan	xiii
Bab 1	
Simulasi Dinamika Molekul dalam Penemuan Obat	1
1.1 Tahapan Penemuan dan Pengembangan Obat	1
1.2 Simulasi Penambatan Molekul	10
1.3 Simulasi Dinamika Molekul	13
Rangkuman Bab 1	14
Bab 2	
Secangkir Kopi dan Penemuan Obat Diabetes	15
2.1 Ada Apa dengan Cinta	15
2.2 Ada Apa dalam Secangkir Kopi?	17
2.3 Kadar Asam Kafeat dalam Ampas Seduhan Secangkir Kopi	20
Rangkuman Bab 2	21
Bab 3	
Metaloproteinase Matriks 9 (MMP9)	23
3.1 Peran MMP9 dalam Penatalaksanaan Diabetes	23
3.2 Simulasi Dinamika Molekul MMP9	24

3.3 Peran Asam Kafeat dalam Stabilisasi MMP9	38
Rangkuman Bab 3	42
Bab 4	
Peran PyPLIF HIPPOS dalam Studi Dinamika Molekul	43
4.1 PyPLIF HIPPOS	43
4.2 Analisis Dinamika Interaksi MMP9 dengan CC27	58
4.3 Analisis Dinamika Interaksi MMP9 dengan Asam Kafeat	62
Rangkuman Bab 4	66
Bab 5	
Potensi Asam Kafeat dalam Penatalaksanaan Diabetes	67
Rangkuman Bab 5	68
Referensi	69
Lampiran	
Skrip-skrip Singkat dan Berkas-berkas <i>Macro</i> YASARA yang Dikembangkan dan Digunakan di Buku Ini	77
Boks 1: Gambar3.2-3.pml	77
Boks 2: md-prep-mmp9-10b.mcr	79
Boks 3: md_run_mmp9-10b.mcr	80
Boks 4: Gambar3.4.pml	85
Boks 5: md_run_mmp9-cac.mcr	86
Boks 6: md_run_mmp9-cac-v2.mcr	91
Boks 7: Gambar3.5.pml	96
Boks 8: prep4H3X.mcr	97
Boks 9: md_convert_4h3x-10b.mcr	98
Boks 10: md_convert_4h3x-cac.mcr	101
Indeks	105
Biografi Singkat Penulis	109



Kepada Yth.:
Kepala Penerbit & Bookshop (P2B)
Universitas Sanata Dharma

FORMULIR PERMOHONAN PENERBITAN BUKU & NO. ISBN

Tanggal: 14 / September / 2021

Judul Buku : ***Secangkir Kopi dan Penemuan Obat Diabetes: Studi Dinamika Molekul***

Penulis : **Prof. apt. Enade Perdana Istyastono, Ph.D.**

Editor : ----

Institusi : Fakultas Farmasi USD

Target Selesai Cetak:	10 / November / 2021		Jumlah Halaman: xvi+125 Hlm.
Ukuran Buku (standar SDUP)	Besar: A4 DIKTI/UNESCO Standar A5 Kecil	21 cm. x 29 cm. 15,5 cm. x 23 cm. 14,8 cm. x 21 cm. 12,5 cm. x 20 cm.	Lainnya:
Kategori	(1) Buku Anak	(2) Buku Dewasa	(3) Buku Karya Penelitian
*Jenis	(1) Buku Fiksi	(2) Buku Non Fiksi	(3) Buku Terjemahan
Media	(1) Buku Tercetak	(2) E-Book	(3) CD, DVD (Elektronik)
Lampiran Wajib	(1) Naskah Hard Copy	(2) Naskah Soft Copy (file berbentuk word/rtf)	(3) Sinopsis/Subjek Buku (minimal 50 karakter)
Pendanaan	(1) SDU Press	(2) Dana Mandiri	(3) Kerja Sama (Lain-Lain): DIKTI, KEMENDIKBUDRISTEK
*Keperluan Buku (Tujuan)	1) kuliah/mengajar , 2) kuliah-terjemahan, 3) buku umum-ilmiah, 4) umum-populer, 5) proceeding, 6) luaran Penelitian/CCP.		
*Bidang Ilmu	A. Sastra B. Bahasa C. Sejarah D. Filsafat E. Psikologi F. Ekonomi G. Pendidikan H. Matematika I. Fisika J. Farmasi K. Teknik L. Ilmu Komputer H. Lainnya:		
Jumlah Oplah & Tempat Cetak (SDUP/Mandiri)	Jumlah 300 eks.	(SDUP / Mandiri) *coret yg tdk perlu	
Korespondensi	surat:	email: enade@usd.ac.id	Telpon: -

Pemohon:

14/09/2021

Prof. apt. Enade Perdana Istyastono, Ph.D.
(No. HP. 081510704594)

Penerima:

Thomas A.H.M.
(SDU Press)



FORMULIR LEMBAR PENERIMAAN NASKAH BUKU UNTUK DITERBITKAN

Nomer: 106 /Produksi_SDU Press/ IX / 2021

1. Judul Naskah : **Secangkir Kopi dan Penemuan Obat Diabetes: Studi Dinamika Molekul**
2. Penulis : **Prof. Apt. Enade Perdana Istyastono, Ph.D.**
3. Instansi/Fakultas/ : **Fakultas Farmasi Universitas Sanata Dharma**
Lainnya
4. Tgl. Permohonan : **14 September 2021**
5. Keperluan Buku : **Luaran Program Penelitian dan Buku Mengajar.**
6. 1. Keterangan

Dari hasil penilaian editor ahli (dewan editor SDUP) dan pertimbangan dari pimpinan SDUP terhadap judul naskah buku tersebut diatas. Bersama ini Sanata Dharma University Press menyatakan bahwa:



Naskah buku diterima tanpa perbaikan (dengan nilai A).



Naskah buku diterima dengan perbaikan (dengan nilai B).



Naskah buku tidak diterima/ditolak (dengan nilai C).

2. Catatan SDUP

Naskah buku diterima dapat diproses untuk pengajuan nomer ISBN yang akan diterbitkan di Sanata Dharma University Press (SDUP) dengan ketentuan sbb.

- a) naskah buku diperbaiki/direvisi sesuai dengan catatan dari editor ahli dan atau SDUP.
- b) seluruh isi naskah buku sepenuhnya menjadi tanggungjawab penulis.

Yogyakarta, 17 September 2021

Pimpinan SDUP



(Dr. Joseph Yapi Taum, M.Hum.)



SANATA DHARMA
UNIVERSITY PRESS

SURAT PENGANTAR

Nomer: 105/Produksi_SDU Press/IX/2021

Perihal : penerbitan buku *Secangkir Kopi dan Penemuan Obat Diabetes ...*,
Lampiran : *dummy* buku.

Yth.

Bapak Prof. Enade Perdana Istyastono, Ph.D., Apt.

(Penulis)

Fakultas Farmasi, Universitas Sanata Dharma

Yogyakarta

Dengah hormat,

Bersama ini kami sampaikan file pdf *dummy/proofreading* buku *Secangkir Kopi dan Penemuan Obat Diabetes: Studi Dinamika Molekul*, kami mohon kesediaan Bapak memberikan koreksi dan catatan pada file tersebut dan mengembalikan ke Penerbit USD untuk proses revisi.

Demikian pengantar ini kami haturkan, atas perhatian dan kerjasamanya kami ucapkan terima kasih.



Yogyakarta, 20 September 2018
SDU Press

Thomas A. Hermawan M.
Staf P2B-USD

* Proofreading milik percetakan, mohon dikembalikan

SANATA DHARMA UNIVERSITY PRESS (SDUP)

LANTAI 1 GEDUNG PERPUSTAKAAN UNIVERSITAS SANATA DHARMA

Jl. Affandi (Gejayan) Mrican Yogyakarta 55281. Telp. (0274) 513 301, 515 352. Ext. 1513 Fax (0274) 562 383. Email: publisher@usd.ac.id