

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
LEMBAR PENGESAHAN	iii
KATA PENGANTAR.....	iv
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI.....	vi
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	viii
BAB I. PENDAHULUAN.....	1
1.1. Latar belakang.....	1
1.2. Rumusan masalah.....	2
1.3 Tujuan dan manfaat penelitian	2
1.4. Hipotesis penelitian	2
1.5. Tempat dan waktu Penelitian	2
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA.....	3
2.1 Kanker	3
1.1.1 Jenis-jenis kanker	3
2.2 Kanker kolon	4
2.2.1 Faktor resiko kanker kolon.....	4
2.2.2 Epidemiologi dan etiologi kanker kolon.....	5
2.2.3 Patofisiologi kanker kolon.....	5
2.2.4 Terapi farmakologi kanker kolon.....	6
2.3 <i>Cyclin dependent kinase 2 (CDK 2)</i>	6
2.4 Penemuan senyawa obat baru secara <i>in silico</i>	8
2.5 Mekanika molekul.....	8
BAB III. METODOLOGI PENELITIAN	10
BAB IV. PROSEDUR PENELITIAN	12
4.1 Optimasi geometri.....	12
4.2 Persiapan protein target	12
4.3 Validasi metode docking.....	12
4.2 Persiapan ligan	12
4.3 Simulasi <i>Docking</i>	12
BAB V. HASIL DAN PEMBAHASAN	14

5.1	Persiapan Reseptor	14
5.2	Persiapan Ligan.....	14
5.2.1	Penentuan Parameter Sifat Fisikokimia	15
5.3	Validasi Docking	20
5.4	Docking Ligan Uji	23
5.5	Uji Toksisitas	26
BAB VI. SIMPULAN DAN SARAN		28
6.1.	Simpulan	28
6.2	Saran	28
DAFTAR PUSTAKA.....		29
Lampiran		30

DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI

Gambar 2.1 Patofisiologi kanker	8
Gambar 5.1 Ligan alami dan protein CDK-2	18
Gambar 5.2 Visualisasi re docking	28
Gambar 5.3 Visualisasi ligan alami-protein CDK-2.	30

DAFTAR TABEL

Tabel V.1 Sifat fisikokimia ligan uji.....	
Tabel V.2 Total energi ligan hasil optimasi geometri.....	
Tabel V.3 HOMO,LUMO, dan Gap energy ligan uji.....	
Tabel V.4 Grid box ligan alami.....	
Tabel V.5 Hasil validasi dan interaksi ikatan ligan reseptor.....	
Tabel V.6 Hasil docking ligan uji.....	
Tabel V.7 Uji toksisitas tes Ames.....	
Tabel V.8 Uji toksisitas tes karsinogenisitas.....	
Tabel V.9 Uji toksisitas terhadap jantung.....	

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN	NAMA
ΔG	Energi Bebas Ikatan
AUC	Area Under Cover
BM	Bobot Molekul
CADD	Computer Aided Drug Design
CDK	Cyclin Dependent Kinase
DFT	Density Functional Theory
DNA	Deoxyribonucleic Acid
GA	Genetic Algorithm
HeRG	Human Ether a Go Go Related Gene
HF	Hatree-Fock
HOMO	Highest Energy Occupied Molecular Orbital
Ki	Konstanta Inhibisi
LBDD	Ligand-Based Drug Design
LUMO	Lowest Energy Occupied Molecular Orbital
LGA	Lamarckian Genetic Algorithm
MM	Mekanika Molekul
PDB	Protein Data Bank
RCSB	Research Collaborating For Structural Biology
RMSD	Root Mean Square Deviation
SBDD	Structure-Based Drug Design
XRD	X-ray Diffraction