

DAFTAR ISI

PERSEMBAHAN	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
PERNYATAAN	iv
PERSETUJUAN	v
KATA PENGANTAR.....	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR SINGKATAN	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
ABSTRAK	xv
<i>ABSTRACT</i>	xvi
BAB I	1
PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Manfaat Penelitain.....	3
BAB II.....	4
TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Kanker Payudara	4
2.1.1 Pengertian Kanker Payudara	4
2.1.2 Etiologi dan Faktor Resiko Kanker Payudara.....	4
2.1.3 Patofisiologi	5
2.1.4 Epidemiologi.....	6
2.2 Reseptor Estrogen Alfa (ER α).....	7
2.3 Terpenoid.....	8
2.3.1 Struktur dan Karakteristik Terpenoid	8
2.3.2 Senyawa Terpenoid dari Genus Amomum.....	9
2.4 Potensi Genus Amomum Sebagai Antikanker	10

2.5	Penambatan Molekul.....	10
2.5.1	Metode Penambatan Molekul	11
2.5.2	Parameter Penambatan Molekul.....	12
2.6	Simulasi Dinamika Molekul	13
2.6.1	Tahapan Dinamika Molekul.....	14
BAB III		17
METODOLOGI		17
3.3	Alat dan Bahan.....	17
3.3.1	Alat.....	17
3.3.2	Bahan.....	17
3.4	Prosedur penelitian.....	18
3.4.1	Persiapan Molekul.....	18
3.4.2	Validasi Metode Penambatan Molekul.....	18
3.4.3	Penambatan Molekul Ligan Uji	18
3.4.4	Analisis Hasil Penambatan Molekul	19
3.4.5	Simulasi Dinamika Molekul	19
BAB IV		21
HASIL DAN PEMBAHASAN.....		21
4.1	Persiapan Molekul	21
4.1.1.	Persiapan Protein Target	21
4.2	Persiapan Ligan.....	22
4.3	Validasi Penambatan Molekul	25
4.4	Penambatan Molekul Ligan Uji	28
4.5	Simulasi Dinamika Molekul.....	35
4.5.1	Root Mean Square Deviation (RMSD).....	35
4.5.2	Root Mean Square Fluctuation (RMSF).....	37
4.5.3	Hasil Ikatan Hidrogen.....	38
4.5.4	Hasil MMGBSA	39
BAB V.....		41
SIMPULAN DAN SARAN		41
5.1	Simpulan.....	41
5.2	Saran.....	41

DAFTAR PUSTAKA	42
LAMPIRAN	48

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur Isopren.....	8
Gambar 4.1 (a) Kompleks reseptor estrogen alfa 3ERT, dan (b) ligan alami	21
Gambar 4.2 Visualisasi Ligan Alami (Tamoxifen).....	26
Gambar 4.3 (a) Interaksi ikatan ligan alami kristalografi, dan (b) Interaksi ikatan ligan alami hasil penambatan molekul.....	27
Gambar 4.5 Visualisasi Rmsd Ligan Uji (a) LA (b) T2 (c) T31, (d) T35, (e) T37, dan (f) T41.....	33
Gambar 4.6 Visualisasi RMSF Ligan Uji.....	36

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Sifat fisikokimia ligan uji.....	23
Tabel 4.2 Pengaturan grid box validasi penambatan molekul.....	25
Tabel 4.3 Hasil penambatan molekul ligan uji.....	29
Tabel 4.4 Okupansi ikatan hidrogen kompleks ($ER\alpha$) dengan ligan.....	38
Tabel 4.5 Hasil Perhitungan MMGBSA	40

DAFTAR SINGKATAN

ER α	Estrogen Receptor Alpha
SERM	Selective Estrogen Receptor Modulator
MD	Molecular Dynamics
RMSD	Root Mean Square Deviation
RMSF	Root Mean Square Fluctuation
MMGBSA	Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area
MM-PBSA	Molecular Mechanics Poisson-Boltzmann Surface Area
PDB	Protein Data Bank
ΔG	Energi Bebas Ikatan (Gibbs Free Energy)
K _i	Konstanta Inhibisi
IC ₅₀	Inhibitory Concentration 50
CPU	Central Processing Unit
RAM	Random Access Memory
SSD	Solid State Drive
HDD	Hard Disk Drive
SBDD	Structure-Based Drug Design
VDW	Van der Waals
EEL	Electrostatic Energi

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Senyawa Terpenoid Genus Amomum	48
Lampiran 2 Visualisasi 2D dan 3D Senyawa Terpenoid Genus Amomum.....	53
Lampiran 3 Visualisasi Interaksi Hasil Penambatan Molekul Ligan Uji	63
Lampiran 4 Hasil cek plagiarisme.....	78
Lampiran 5 Kartu bimbingan	79
Lampiran 6 Riwayat hidup.....	80