

DAFTAR ISI

COVER	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
HALAMAN PERSETUJUAN	iiii
KATA PENGANTAR	v
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR SINGKATAN	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
ABSTRAK	xiii
ABSTRACT	xiv
BAB I. PENDAHULUAN	
I.1. Latar Belakang.....	1
I.2. Rumusan Masalah.....	3
I.3. Tujuan Penelitian.....	3
I.4. Manfaat Penelitian.....	4
I.5. Waktu Dan Tempat Penelitian.....	4
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	
II.1 Human Immunodeficiency Virus (HIV).....	5
II.1.1 Definisi.....	5
II.1.2 Epidemiologi HIV.....	6
II.1.3 Terapi HIV.....	7
II.1.4 Etiologi HIV.....	8
II.1.5 Patofisiologi.....	8
II.2 Kimia Komputasi.....	9
II.3 Sumber Dataset Dan Database.....	9
II.3.1 Active set compound.....	9
II.3.2 Decoy set compound.....	10
II.3.3 Database uji.....	10
II.4 Virtual screening.....	10
II.4.1 Jenis-Jenis Dari Virtual Screening.....	11
II.5 Protein Data Bank (PDB).....	12
II.6 Model Farmakofor.....	12
II.7 Validasi Virtual Screening.....	13
BAB III. METODOLOGI PENELITIAN	

BAB. IV PROSEDUR

IV.1 ALAT DAN BAHAN.....	18
IV.2 PROSEDUR PENELITIAN	19
1. Penyiapan protein.....	19
2. Preparasi Database Senyawa Aktif Dan Decoy	19
3. Pemodelan Farmakofor	19
4. Validasi Model Farmakofor	19
5. Penapisan Virtual Screening Berbasis Farmakofor	19
6. Penambatan Molekul	20

BAB V. HASIL DAN PEMBAHASAN

V.1. struktur inhibitor HIV-1 integrase	21
V.2. Database, dataset senyawa aktif dan dataset senyawa pengecoh.....	22
V.2.1. Database.....	22
V.2.2 Dataset senyawa aktif dan senyawa pengecoh (decoy)	22
V.3 Penapisan Virtual berbasis farmakofor.....	23
V.3.1 Model farmakofor	23
V.3.2 pemodelan farmakofor	25
V.3.3. Penapisan virtual database dengan model farmakofor.....	32
V.4. Prediksi ADMET dan Lipinski's	35
V.4.1 Prediksi ADMET	35
V.4.2. Prediksi Lipinski's rule	35
V.5 PENAMBATAN MOLECULAR DOCKING MENGGUNAKAN AUTODOCK TOOLS	37
V.5.1. Preparasi Protein Target Inhibitor Hiv Integrase	37
V.5.2. Validasi Metode	38
V.5.3. PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA BAHAN ALAM	40

BAB VI. KESIMPULAN DAN SARAN

VI.1 Kesimpulan	50
VI.2 Saran	50
DARTAR PUSTAKA.....	51

DAFTAR TABEL

Tabel 1.	Database ZINC <i>Natural Products</i>	22
Tabel 2.	Parameter validasi model farmakofor.....	26
Tabel 3.	Hasil penapisan virtual terhadap database zinc natural product berdasarkan pemodelan farmakofor	33
Tabel 4.	Hasil penapisan virtual terhadap database zinc natural product berdasarkan evaluasi ADMET dan Lipinski's Rule	36
Tabel 5.	Hasil interaksi senyawa uji dengan residu asam amino	39
Tabel 6.	Hasil Visualisasi Interaksi Senyawa Uji.....	40

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.	Struktur Inhibitor HIV integrase	21
Gambar 2.	Struktur 2D Ligan alami CIW	21
Gambar 3.	Fitur awal farmakofor ligan alami CIW221 terhadap target 3NF7 tampilan dua dimensi.....	23
Gambar 4.	Fitur awal farmakofor ligan alami CIW221 terhadap target 3NF7 tampilan tiga dimensi	23
Gambar 5.	Kruva ROC.....	25
Gambar 6.	Fitur model farmakofor (a) dan rata-rata fitscore tervalidasi (b).....	26
Gambar 7.	Diagram senyawa lolos farmakofor.....	34
Gambar 8.	Diagram senyawa yang yang lolos ADMET dan Lipinski's.....	37
Gambar 9.	Struktur Kristal Enzim HIV Integrase (a) dan Ligan Alami CIW 5-[(5-chloro-2-oxo-2,3- dihydro-1H-indol-1-yl)methyl]-1,3-benzodioxole -4-carboxylic acid (b).....	38
Gambar 10.	Tumpang Tindih Ligan (kuning) Sebelum Validasi (hijau) Setelah Validasi	39
Gambar 11.	Visualisasi interaksi Enzim HIV Integrase dengan Ligan Alami	39

DAFTAR SINGKATAN

1. HIV (Human Immunodeficiency Virus)	1
2. AIDS (Acquired Immune Deficiency Syndrome)	1
3. ART (Terapi antiretroviral)	2
4. PDB (Protein Data Bank)	19

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Preparasi protein target inhibitor HIV integrase	53
Lampiran 2. Preparasi senyawa aktif berdasarkan IC50	54
Lampiran 3. Validasi metode farmakofor.....	57
Lampiran 4. Hasil skrining database Zinc Natural Product.....	62
Lampiran 5. Hasil validasi penembatan molekul	85
Lampiran 6. Hasil penambatan senyawa uji.....	91
Lampiran 7. Hasil turnitin.....	92
Lampiran 8. Kartu bimbingan.....	96
Lampiran 9. CV.....	99