

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR.....	iv
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI.....	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN.....	x
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	xi
BAB I.....	1
PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan dan Manfaat Penelitian.....	2
1.3.1 Tujuan Penelitian.....	2
1.3.2 Manfaat Penelitian.....	2
2. Hipotesis Penelitian.....	2
3. Tempat dan Waktu Penelitian	2
BAB II.....	4
TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Tinjauan tentang Kanker Payudara	4
2.1.1 Definisi Kanker Payudara.....	4
2.1.2 Gejala Umum Kanker Payudara.....	4
2.1.3 Faktor Resiko Kanker Payudara.....	4
2.1.4 Pencegahan Kanker Payudara	5
2.2 Tinjauan tentang Skrining Virtual Berbasis Farmakofofor	5
2.3 <i>Molecular Dociing</i>	7
2.4 Database Zink Natural Product.....	8
BAB III.....	12
METODOLOGI PENELITIAN	12
3.1 Lokasi dan Waktu Penelitian.....	12
3.2 Subyek Penelitian.....	12
3.3 Metode Pengumpulan Data.....	12
3.4 Analisis Data.....	12
3.4.1 Pemodelan Farmakofofor dan Validasi Model.....	12
3.4.2 Validasi dan Virtual Screening Docking.....	12
BAB IV	14
PROSEDUR PENELITIAN.....	14

4.1	Alat dan Bahan	14
4.1.1	Alat	14
4.1.2	Bahan	14
4.2	Preparasi struktur protein target	14
4.3	Preparasi dataset	15
4.3.1	Pemilihan dataset senyawa aktif	15
4.3.2	Konversi hasil active set compound	15
4.3.3	Pencarian dataset senyawa tidak aktif	15
4.4	Penapisan virtual berbasis farmakofor	15
4.4.1	Konversi dataset senyawa aktif dan senyawa tidak aktif	15
4.4.2	Optimasi ligan alami	16
4.4.3	Pemodelan farmakofor	16
4.4.4	Validasi model farmakofor	16
4.4.5	Penapisan virtual database dengan model farmakofor	16
4.4.6	Analisis hasil virtual screening	17
4.5	Penapisan virtual berbasis molecular docking	17
4.5.1	Pemisahan struktur protein dengan ligan	17
4.5.2	Lokasi target penambatan menggunakan autodock wizard	17
4.5.3	Lokasi target penambatan menggunakan vina wizard	17
4.5.4	Validasi penapisan virtual menggunakan vina wizard	18
4.6	Penapisan virtual database berbasis docking	18
BAB V.		19
HASIL DAN PEMBAHASAN		19
V.1.	Senyawa Dadap Ayam	19
V.2.	Database, dataset senyawa aktif dan dataset senyawa pengecoh	20
V.3.	Pemodelan Farmakofor	21
V.4.	Validasi Model Farmakofor	22
V.5.	Skrining Berbasis Model farmakofor	24
V.6.	Struktur EGFR	25
V.7.	Validasi Docking	26
V.8.	Validasi Virtual Skrining	26
V.9.	Virtual Skrining Menggunakan Autodock Vina	27
BAB VI.		30
KESIMPULAN DAN SARAN		30
VI.I	Kesimpulan	30
VI.II	Saran	30
DAFTAR PUSTAKA		31

LAMPIRAN.....	35
----------------------	-----------

DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI

Gambar 1. Farmakofor Model 6	23
Gambar 2. Fitur Farmakofor	24
Gambar 3. Protein Data Bank ID : 7JXQ.....	25
Gambar 4. Overlay Ligan	26
Gambar 5. Kurva ROC (0,76) dan Nilai EF (3,5).....	27

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Senyawa Dadap Ayam.....	19
Tabel 2. Database ZINC Natural Product	21
Tabel 3. Fitur Farmakofor.....	22
Tabel 4. Validasi Model Farmakofor	23
Tabel 5. Hasil Skrining Virtual Berbasis Farmakofor	24
Tabel 6. Box Koordinat Validasi	26
Tabel 7. Hasil Virtual Screening Menggunakan Molecular Docking.....	27
Tabel 8. Nilai Binding Energy	28

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Validasi dan Visualisasi Model Farmakofor	35
Lampiran 2. Hasil Virtual Screening Autodock Vina	37
Lampiran 3. Visualisasi Interaksi Senyawa	39

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN	NAMA
EGFR	Epidermal Growth Factor Reseptor
AUC	Area Under Curve
ROC	Receiver Operating Characteristic
Sp	Spesifisitas
Sv	Sensitivitas
Ya	Yield Of Activies
TP	True Positive
FP	False Positive
TN	True Negative
FN	False Negative
RMSD	Root Mean Square Deviation