

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN.....	ii
PERSETUJUAN	iv
KATA PENGANTAR.....	v
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR LAMPIRAN.....	xi
ABSTRAK	xii
ABSTRACT.....	xiii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Tujuan Penelitian	4
1.4 Hipotesis	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	5
2.1 Kanker Payudara.....	5
2.1.1 Pengertian Kanker Payudara.....	5
2.1.2 Etiologi dan Faktor Resiko Kanker Payudara	5
2.1.3 Patofisiologi	6
2.1.4 Epidemiologi Kanker Payudara	8
2.2 Sel MDA-MB-231	8
2.3 Reseptor Estrogen Alfa	10
2.4 Skopoletin	11
2.5 Hubungan Kuantitatif Struktur Aktifitas (HKSA)	12
2.5.1 Model Pendekatan Analisis dalam HKSA	14
2.6 Metode Hansch	15
2.6.1 Parameter dalam HKSA Model Hansch	16
2.7 Analisis Statistik dalam HKSA.....	21
2.7.1 Analisis Regresi Multilinier	21
2.8 Deskriptor	23
2.9 Penambatan Molekul	23

BAB III METODE PENELITIAN	26
3.1 Tempat Dan Waktu Penelitian	28
3.2 Alat.....	28
3.2.1 Perangkat Keras	28
3.2.2 Perangkat Lunak	28
3.3 Bahan	28
3. 4 Prosedur Kerja	28
3.4.1 Pengumpulan Data	28
3.4.2 Optimasi Geometri dan Perhitungan Deskriptor.....	29
3.4.3 Pembuatan Model HKSA.....	29
3.4.4 Desain Senyawa Turunan Baru.....	30
3.4.5 Penambatan Molekul.....	30
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	32
4.1 Pengumpulan Data	32
I.2 Optimasi Geometri dan Perhitungan Deskriptor	34
4.3 Pembuatan Model Persamaan HKSA	42
4.4 Validasi persamaan HKSA	44
4.5 Desain senyawa turunan baru	47
4.6 Penambatan Molekul	51
4.6.1 Penyiapan Protein Target	51
4.6.2 Validasi Penambatan Molekul	52
4.6.3 Penambatan Molekul Senyawa turunan baru.....	54
BAB V KESIMPULAN	58
5. 1 Kesimpulan	58
DAFTAR PUSTAKA.....	59
LAMPIRAN.....	61

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Patofisiologi kanker payudara	7
Tabel 4.1 Dataset turunan skopoletin	32
Tabel 4.2 Senyawa turunan sebelum dan sesudah optimasi.....	35
Tabel 4.3 Data perhitungan deskriptor	41
Tabel 4.4 Kombinasi deskriptor dari Buildqsar	42
Tabel 4.5 Hasil perbandingan nilai LogIC50Eksperimen dan LogIC50Prediksi. 44	
Tabel 4.6 Model persamaan setelah penghapusan data outlier	45
Tabel 4.7 Hasil Validasi	47
Tabel 4.8 Modifikasi senyawa.....	48
Tabel 4.9 Hasil nilai deskriptor senyawa baru	50
Tabel 4.10 Parameter validasi penambatan molekul.....	53
Tabel 4.11 Hasil penambatan molekul senyawa turunan baru	54

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Sel MDA-MB-231 Dalam kultur (Culture collection,n d.).	9
Gambar 2.2 Struktur skopoletin	11
Gambar 4.1 Struktur induk skopoletin.....	32
Gambar 4.2 Hubungan antara LogIC ₅₀ prediksi dan LogIC ₅₀ eksperimen.....	46
Gambar 4.3 Senyawa induk.....	48
Gambar 4.4 (a) Makromolekul lengkap (b)Makromolekul (c)Ligan alami	52
Gambar 4.5 Visualisasi ligan alami hasil redoking	53

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Struktur lengkap 2D Senyawa Turunan Skopoletin	61
Lampiran 2 Struktur 2D Senyawa Turunan Baru.....	61
Lampiran 3 Visualisasi Interaksi hasil Penambatan Molekul ligan uji	66
Lampiran 4. Hasil Cek Plagiarisme.....	73
Lampiran 5. Kartu Bimbingan.....	74
Lampiran 6. Daftar Riwayat Hidup	75