

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	iii
HALAMAN PERNYATAAN	iv
KATA PENGANTAR	v
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	xii
ABSTRAK	xiii
ABSTRACT	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	4
1.4 Manfaat Penelitian.....	4
1.5 Hipotesis Penelitian.....	4
1.6 Tempat dan Waktu Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Kanker	5
2.2 Kanker Serviks	6
2.3 Terapi dan Pengobatan kanker Serviks.....	8
2.4 Kesumba Keling (Bixa Orellana L.).....	9
2.5 Klasifikasi Tanaman Kesumba Keling (Bixa Orellana L.).....	9
2.6 Aktivitas Tanaman Kesumba Keling (Bixa Orellana L.).....	10
2.7 Aktivitas Tanaman Kesumba Keling (Bixa Orellana L.).....	10
2.8 Vaccinia H1-Related Phosphatase (VHR)	11
2.9 Penambatan Molekul	11
2.10 Resource	13
2.11 Simulasi Dinamika Molekul	15
2.12 Perangkat Lunak	16

BAB III METODOLOGI PENELITIAN	18
3.1 Perangkat Komputasi.....	19
3.1.1 Perangkat keras	19
3.1.2 Perangkat lunak	19
3.2 Bahan.....	19
3.3 Prosedur Penelitian.....	19
3.3.1 Persiapan protein target	19
3.3.2 Persiapan ligan	20
3.3.3 Validasi prosedur docking	20
3.3.4 Penambatan molekul senyawa uji	20
3.3.5 Analisis hasil docking.....	20
3.3.6 Visualisasi dinamika molekul.....	21
3.3.7 Tahapan dinamika molekul.....	21
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	23
4.1 Penyiapan Ligan Uji	23
4.1.1 Parameter sifat fisikokimia.....	23
4.2 Struktur 3D dari VHR dan Ligan Alami.....	25
4.3 Validasi Penambatan Molekul	26
4.4 Penambatan Molekul Menggunakan Autodock.....	29
4.5 Analisis Hasil Simulasi Dinamika Molekul	31
4.5.1 Root mean square deviation (RMSD)	31
4.5.2 Analisis RMSF	35
4.5.3 Analisis MMGBSA	37
BAB V SIMPULAN DAN SARAN.....	39
5.1 Kesimpulan.....	39
5.2 Saran	39
DAFTAR PUSTAKA.....	40
LAMPIRAN.....	44

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1. Mekanisme infeksi HPV penyebab kanker serviks	7
Gambar 2.2. Kesumba keling (Bixa Orellana L.).....	9
Gambar 4.1. Reseptor Vaccinia H1-Related Phosphatase (VHR) dan ligan alami (a) makromolekul reseptor VHR (5UU1) dan (b) Ligan alami	25
Gambar 4.2. Hasil overlay ligan alami & ligan redocking	27
Gambar 4.3. Visualisasi interaksi reseptor Vaccina H1-related phosphatase (VHR) dan ligan alami	28
Gambar 4.4. 5UU1-ligan alami	32
Gambar 4.5. 5UU1-luteolin 7-sulfate	32
Gambar 4.6. 5UU1 - 8-Hydroxyluteolin 7-sulfate	33
Gambar 4.7. 5UU1-Chrysin.....	33
Gambar 4.8. Fluktuasi Hasil RMSD Ligan Alami dan Ligan Uji	34
Gambar 4.9. Grafik RMSF	36

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1. Hasil skrining sifat fisikokimia ligan uji	24
Tabel 4.2. Parameter penambatan molekul.....	27
Tabel 4.3. Hasil penambatan molekul ligan uji	29
Tabel 4.4. Fluktuasi residu asam amino sisi aktif.....	36
Tabel 4.5. Analisis MMGBSA.....	37

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Daftar senyawa uji yang digunakan pada penelitian	44
Lampiran 2. Daftar senyawa uji lipinski of five.....	53
Lampiran 3. Daftar senyawa lolos uji lipinski rule of five.....	54
Lampiran 4. Hasil molecular docking	55
Lampiran 5. Daftar ikatan senyawa uji yang digunakan pada penelitian.....	56
Lampiran 6. Preotein dan ligan alami	64
Lampiran 7. Visualisasi ikatan ligan alami.....	65
Lampiran 8. VMD senyawa uji terbaik	67
Lampiran 9. Daftar pergerakan simulasi	71
Lampiran 10. Hasil plagiarisme	79
Lampiran 11. Kartu bimbingan	80
Lampiran 12. Curriculum Vitae.....	82

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN	NAMA
N.M.R.	Nuclear Magnetic Resonance
HPLC	High Performance Liquid Chromatography
PCR	Polymerase Chain Reaction
HPV	Human Papilloma Virus
PDB	<i>Protein Data Bank</i>
RMSD	<i>Root Mean Square Deviation</i>
RCSB	<i>Research Collaboratory for Structural Bioinformatics</i>
ROC	<i>Receiver Operating Characteristic</i>
VS	<i>Virtual Screening</i>
ΔG	Energi ikatan