

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b>	<b>iv</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>v</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>vi</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>viii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>ix</b>
<b>DAFTAR ISTILAH</b>	<b>xi</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	<b>xiii</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xiv</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xv</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	<b>5</b>
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Pengobatan kanker	5
II.1.2 Senyawa pirazolina	7
II.1.3 Hubungan kuantitatif struktur-aktivitas (HKSA)	9
II.1.4 Hubungan kuantitatif struktur-aktivitas-3D (HKSA-3D)	11
II.1.5 Validasi persamaan HKSA	14
II.1.6 <i>Multiple linear regression</i> (MLR)	17
II.1.7 <i>Partial least squares</i> (PLS)	18
II.1.8 <i>k-nearest neighbor molecular field analysis</i> (kNN-MFA)	19
II.1.9 Penambatan molekul	20
II.1.10 AutoDock Vina	22
II.1.11 <i>Epidermal growth factor receptor</i> (EGFR)	24
II.1.12 Optimasi Geometri	27
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	29
II.2.1 Perumusan hipotesis I	29
II.2.2 Perumusan hipotesis II	29
II.2.3 Perumusan hipotesis III	30
II.2.4 Rancangan penelitian	30
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	<b>32</b>
III.1 Alat Penelitian	32

III.2	Bahan Penelitian	32
III.3	Prosedur Penelitian	34
III.3.1	Pemilihan metode kimia komputasi	34
III.3.2	Perhitungan deskriptor-3D	34
III.3.3	Analisis dan pemilihan model HKSA-3D	35
III.3.4	Desain senyawa turunan pirazolina	36
III.3.5	Penambatan molekul terhadap EGFR-TK	37
<b>BAB IV</b>	<b>HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>39</b>
IV.1	Pemilihan Metode Kimia Komputasi	39
IV.2	Perhitungan Deskriptor-3D dan Pemilihan Data Set	42
IV.3	Analisis dan Pemilihan Persamaan HKSA-3D	46
IV.4	Analisis Peta Kontur dan Desain Senyawa Baru	52
IV.5	Penambatan Molekul Senyawa Desain	58
<b>BAB V</b>	<b>KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>70</b>
V.1	Kesimpulan	70
V.2	Saran	70
	<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>71</b>
	<b>LAMPIRAN</b>	<b>78</b>