

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iv
HALAMAN PERSEMBAHAN	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL.....	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
DAFTAR SINGKATAN	xiii
INTISARI	xiv
ABSTRACT.....	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang.....	1
B. Rumusan masalah	6
C. Tujuan penelitian	6
D. Manfaat penelitian	7
E. Tinjauan Pustaka.....	7
F. Landasan Teori	24
G. Keterangan Empiris	26
H. Hipotesis	26
BAB II METODOLOGI PENELITIAN	27
A. Bahan dan Alat Penelitian	27
B. Fasilitas yang Digunakan.....	28
C. Definisi Operasional	28
D. Variabel Penelitian.....	29
E. Prosedur Pelaksanaan	29

F. Skema penelitian.....	33
BAB III HASIL DAN PEMBAHASAN	34
BAB IV KESIMPULAN DAN SARAN	82
A. Kesimpulan	82
B. Saran	82
DAFTAR PUSTAKA	83
LAMPIRAN.....	90

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. Tanaman Ketapang (<i>Terminalia catappa</i> L.).....	7
Gambar 2. Contoh struktur konstituen kimia tanaman Ketapang.....	9
Gambar 3. Jalur biokimia yang terlibat dalam patofisiologi PCOS.....	12
Gambar 4. Jalur hipotalamus - pituitari - ovarium dan steroidogenesis	15
Gambar 5. Jalur steroidogenesis dan senyawa yang dihasilkan.....	16
Gambar 6. Perbandingan struktur senyawa steroid dan triterpenoid	25
Gambar 7. Skema jalannya penelitian.....	33
Gambar 8. Struktur 3D, binding site, dan kepolaran binding site enzim CYP17 ..	42
Gambar 9. Variabel-variabel kualitas kristal protein enzim CYP17	46
Gambar 10. Perbandingan sekuens asam amino kristal protein enzim CYP17	46
Gambar 11. Letak 3D ketidaklengkapan asam amino protein 6WW0	47
Gambar 12. Plot Score docking vs pIC ₅₀ reference ligand senyawa steroid.....	51
Gambar 13. Plot Score docking vs pIC ₅₀ reference ligand senyawa flavonoid	53
Gambar 14. Perbandingan nilai pIC ₅₀ senyawa uji.....	57
Gambar 15. Mode ikat 3D reference ligand terhadap enzim CYP17	61
Gambar 16. Mode ikat reference ligand yang berinteraksi dengan kompleks heme pada enzim CYP17	61
Gambar 17. Perbandingan pose flavonoid aglikon dan glikosida.....	64
Gambar 18. Mode ikat ligan uji flavonoid glikosida terhadap enzim CYP17.	66
Gambar 19. Mode ikat ligan uji flavonoid glikosida yang berinteraksi dengan kompleks heme pada enzim CYP17	67
Gambar 20. Perbandingan pose Arjunetin dan native ligand pada enzim CYP17 ..	68
Gambar 21. Mode ikat arjunetin pada enzim CYP17	69
Gambar 22. Perbandingan pose native ligand, arjungenin, dan arjunolic acid.....	70
Gambar 23. Mode ikat ligan uji golongan triterpenoid terhadap enzim CYP17 ..	71
Gambar 24. Mode ikat ligan uji triterpenoid turunan oleanane yang berinteraksi dengan kompleks heme pada enzim CYP17.....	71
Gambar 25. Mode ikat ligan arjunolic acid pada enzim CYP17	72
Gambar 26. Mode ikat ligan uji tanin yang dapat terhidrolisis terhadap enzim CYP17.....	74
Gambar 27. Mode ikat ligan uji tanin yang dapat terhidrolisis yang berinteraksi dengan kompleks heme pada enzim CYP17.....	74
Gambar 28. Mode ikat ligan uji tanin terkondensasi terhadap enzim CYP17.....	75
Gambar 29. Mode ikat ligan uji tanin terkondensasi yang berinteraksi dengan kompleks heme pada enzim CYP17	76
Gambar 30. Interaksi senyawa mangiferin dengan enzim CYP17	78

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Kompilasi kandungan kimia <i>Terminalia catappa</i> L	34
Tabel 2. Perbandingan variabel kualitas kristal protein enzim CYP17	45
Tabel 3. Nilai RMSD Enzim CYP17	48
Tabel 4. Validasi scoring enzim CYP17 berdasarkan senyawa steroid	48
Tabel 5. Plot <i>Score docking</i> vs pIC ₅₀ senyawa steroid	51
Tabel 6. Validasi scoring enzim CYP17 berdasarkan senyawa flavonoid	52
Tabel 7. Plot <i>Score docking</i> vs pIC ₅₀ senyawa kerangka flavonoid	53
Tabel 8. Hasil docking senyawa uji pada enzim CYP17	54

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Daftar Konstituen Kimia <i>Terminalia catappa</i> L.	90
Lampiran 2. <i>Reference ligands</i> untuk validasi scoring senyawa steroid	103
Lampiran 3. <i>Reference ligands</i> untuk validasi scoring senyawa flavonoid	118
Lampiran 4. Grafik Validasi Scoring Senyawa Steroid	122
Lampiran 5. Grafik Validasi Scoring Senyawa Mirip Flavonoid	123
Lampiran 6. Pose <i>reference ligand</i> senyawa steroid dan <i>native ligand</i>	125
Lampiran 7. Pose <i>reference ligand</i> senyawa flavonoid dan <i>native ligand</i>	125