

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Sel kanker payudara MDA-MB-231	5
II.1.2 Senyawa hibrida pirazol dan hidrazon-hidrazida sebagai antikanker sel MDA-MB-231	6
II.1.3 Metode SBDD dalam pengembangan antikanker sel MDA-MB-231	10
II.1.4 Protein <i>Maternal Embryonic Leucine Zipper Kinase</i> (MELK) sebagai protein reseptor pada metode SBDD	15
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	17
II.2.1 Perumusan hipotesis I	17
II.2.2 Perumusan hipotesis II	18
II.2.3 Rancangan penelitian	19
BAB III METODE PENELITIAN	20
III.1 Alat Penelitian	20
III.2 Bahan Penelitian	20
III.3 Prosedur Penelitian	23
II.3.1 Optimasi senyawa-senyawa usulan hibrida pirazol dan hidrazon-hidrazida	23
II.3.2 Penambatan molekuler terhadap protein MELK	23
II.3.3 Simulasi dinamika molekuler	24
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	26
IV.1 Penentuan Struktur Senyawa melalui Optimasi Geometri	26
IV.2 Penambatan Molekuler terhadap Protein MELK	27
IV.2.1 Penambatan molekuler ulang senyawa alami OTTSP-167	28
IV.2.2 Penambatan molekuler senyawa acuan 0	31
IV.2.3 Penambatan molekuler senyawa usulan 1	32

IV.2.4	Penambatan molekul senyawa usulan 2	34
IV.2.5	Penambatan molekul senyawa usulan 3	36
IV.2.6	Penambatan molekul senyawa usulan 4	38
IV.2.7	Penambatan molekul senyawa usulan 5	39
IV.2.8	Penambatan molekul senyawa pembanding emodin	41
IV.2.9	Penambatan molekul senyawa pembanding isoliquitirigenin	43
IV.2.10	Perbandingan seluruh hasil penambatan molekul	45
IV.3	Simulasi Dinamika Molekuler	49
IV.3.1	Analisis Root Mean Square Deviation (RMSD)	50
IV.3.2	Analisis Root Mean Square Fluctuation (RMSF)	51
IV.3.3	Analisis Radius of gyration (Rg)	52
IV.3.4	Analisis Solvent Accesible Surface Area (SASA)	53
IV.3.5	Analisis jumlah ikatan hidrogen	55
IV.4	Analisis Retrosintesis Senyawa Usulan	57
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	60
V.1	Kesimpulan	60
V.2	Saran	60
	DAFTAR PUSTAKA	61
	LAMPIRAN	67