

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
INTISARI	xiv
ABSTRACT	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	7
II.1 Tinjauan Pustaka	7
II.1.1 Kanker lambung	7
II.1.2 Protein p53	7
II.1.4 Turunan quinazolina	9
II.1.5 Penambatan molekul	11
II.1.6 Dinamika Molekul (MD)	12
II.1.7 <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD)	13
II.1.8 Interaksi hidrogen	14
II.1.9 <i>Root Mean Square Fluctuation</i> (RMSF)	15
II.1.10 <i>Radius of Gyration</i> (Rg)	16
II.1.11 <i>Solvent Accessible Surface Area</i> (SASA)	16
II.1.12 Energi ikat MM/PBSA	17
II.1.13 ADMET	18
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	19
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	19
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	20
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	20
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	21

II.2.5 Rancangan penelitian	22
BAB III METODE PENELITIAN	23
III.1 Model Molekul	23
III.2 Alat Penelitian	23
III.3 Prosedur Penelitian	23
III.3.1 Penambatan molekul senyawa turunan quinazolina	23
III.3.2 Simulasi MD	25
III.3.3 ADMET	26
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	28
IV.1 Penambatan Molekul	28
IV.2 Penambatan Molekul dan Modifikasi Senyawa Quinazolina	31
IV.2.1 Penambahan gugus fungsi pada turunan quinazolina dengan reseptor p53	35
IV.2.2 Penambahan gugus fungsi pada turunan quinazolina dengan reseptor EGFR	44
IV.3 Dinamika Molekul (MD)	48
IV.3.1 Simulasi MD senyawa usulan pada reseptor p53	48
IV.3.2 Simulasi MD senyawa usulan pada reseptor EGFR	59
IV.4 Analisis ADMET Senyawa Usulan	67
IV.5 Analisis Retrosintesis dan Usulan Tahapan Sintesis	71
IV.5.1 Analisis retrosintesis	71
IV.5.2 Usulan tahapan sintesis	74
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	78
V.1 Kesimpulan	78
V.2 Saran	78
DAFTAR PUSTAKA	79
LAMPIRAN	90