

DAFTAR ISI

HALAMAN PERSETUJUAN	i
HALAMAN PERSEMBAHAN	ii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
DAFTAR SINGKATAN	xii
ABSTRACT	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang Penelitian	1
B. Rumusan Masalah	3
C. Keaslian Penelitian	4
D. Manfaat Penelitian	9
E. Tujuan Penelitian	10
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	11
A. Telaah Pustaka	11
1. Karsinogenesis kanker payudara dan terapinya	11
2. Protein <i>Human Epidermal Growth Factor Receptor 2 (HER2)</i> dan peranannya dalam progresivitas kanker payudara	16
3. Inhibitor ganda tirosin kinase lapatinib sebagai terapi kanker payudara tertarget HER2	18
4. Potensi Kurkumin dan turunannya dalam pengatasan progresivitas kanker payudara	23
5. Pendekatan <i>Computer Aided Drug Design (CADD)</i>	27
B. Landasan Teori atau Dasar Pemikiran Teoritis	34
C. Kerangka Konsep	36
D. Keterangan Empiris	36
BAB III. METODE PENELITIAN	37

A.	Desain Rancangan Penelitian	37
B.	Bahan, Subyek, Atau Materi Penelitian	39
B.	Identifikasi Variabel Penelitian	41
C.	Definisi Operasional Variabel	41
D.	Instrumen Penelitian	42
E.	Jalannya Penelitian.....	43
	1. Preparasi dan pengorganisasian data turunan senyawa kurkumin.....	43
	2. Pembuatan desain mutasi her2 secara <i>in silico</i> menggunakan perangkat lunak MOE	43
	3. Simulasi molecular docking	44
	4. Simulasi molecular dynamics.....	45
	5. Estimasi Energi Bebas Pengikatan menggunakan metode MM-GBSA46	
F.	Analisis Data	47
	1. Analisis Afinitas Pengikatan (Scoring Molecular <i>Docking</i>)	47
	2. Validasi pose dan interaksi residu aktif.....	47
	3. Analisis molecular dynamic (MD trajectory analysis).....	48
	4. Analisis profil ADMET.....	48
	BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	49
A.	Hasil Penelitian.....	49
	1. Pengumpulan Data Kurkumin dan Skrining <i>Docking</i> Molekuler HER2 <i>wild type</i>	49
	2. Konstruksi Mutasi HER2.....	55
	3. Skrining <i>Molecular Docking</i> Turunan Kurkumin terhadap HER2 WT dan Mutan.....	58
	4. Simulasi <i>Molecular Dynamics</i> Derivatif Kurkumin Terpilih dalam Kompleks dengan Mutasi HER2.....	64
	5. Profil ADMET dari Turunan Kurkumin oleh pkCSM	73
	BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	75
A.	Kesimpulan.....	75
B.	Saran	75
	DAFTAR PUSTAKA	77