

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
PRAKATA	v
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
DAFTAR PUBLIKASI DAN SEMINAR	xii
DAFTAR ISTILAH, SINGKATAN, DAN LAMBANG	xiii
INTISARI	xiv
ABSTRACT	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan dan Manfaat Penelitian	4
I.2.1 Tujuan penelitian	4
I.2.2 Manfaat penelitian	4
I.3 Keaslian dan Kebaruan Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	8
II.1 Tinjauan Pustaka	8
II.1.1 Protein <i>Epidermal Growth Factor Receptor</i> (EGFR)	8
II.1.2 Senyawa turunan quinazolin sebagai inhibitor EGFR	10
II.1.3 Analisis QSAR (<i>Quantitative Structure Activity Relationship</i>)	13
II.1.4 Penambatan molekul	20
II.1.5 Simulasi dinamika molekul	26
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	34
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	34
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	34
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	35
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	35
II.2.5 Perumusan hipotesis 5	35
II.2.6 Rancangan penelitian	36
BAB III METODE PENELITIAN	38
III.1 Alat dan Bahan Penelitian	38
III.1.1 Alat penelitian	38
III.1.2 Bahan penelitian	38
III.2 Prosedur Penelitian	40
III.2.1 Desain senyawa menggunakan hasil analisis QSAR	40
III.2.2 Desain senyawa menggunakan hasil analisis penambatan molekul	42
III.2.3 Interaksi	42
III.2.4 Simulasi dinamika molekul	44

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	45
IV.1 QSAR: Desain Senyawa, Interaksi, dan Simulasi Dinamika Molekul	45
IV.1.1 Desain senyawa	45
IV.1.2 Interaksi	54
IV.1.3 Simulasi dinamika molekul	58
IV.2 Penambatan Molekul: Desain Senyawa, Interaksi, dan Simulasi Dinamika Molekul	63
IV.2.1 Desain senyawa	63
IV.2.2 Interaksi	66
IV.2.3 Simulasi dinamika molekul	70
IV.3 Perbandingan Desain Senyawa Hasil Analisis QSAR dan Penambatan Molekul	77
IV.4 Analisis Retrosintesis	78
IV.4.1 Analisis retrosintesis senyawa rancangan hasil QSAR	78
IV.4.2 Analisis retrosintesis senyawa rancangan hasil penambatan molekul	82
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	85
V.1 Kesimpulan	85
V.2 Saran	86
DAFTAR PUSTAKA	87
LAMPIRAN	95