

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
DAFTAR SINGKATAN, ISTILAH, DAN LAMBANG	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
I.4 Keterbaruan Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	6
II.1 Tinjauan Pustaka	6
II.1.1 Flavonol	6
II.1.2 <i>Death-associated protein kinase 1</i> (DAPK 1)	8
II.1.3 <i>Similarity structure</i>	9
II.1.4 Penambatan molekul	10
II.1.5 Simulasi dinamika Molekular	11
II.2.1 Perumusan Hipotesis	14
II.2.3 Rancangan Penelitian	16
BAB III METODE PERCOBAAN	17
III.1 Bahan Penelitian	17
III.2 Alat Penelitian	17
III.3 Prosedur Penelitian	17
III.3.1 <i>Redocking</i> dan <i>docking</i> molekul flavonol	17
III.3.2 Simulasi dinamika Molekular flavonol dalam air	18
III.3.3 Simulasi dinamika Molekular kompleks flavonol-DAPK 1 dalam air	18
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	20
IV.1 Molecular Docking Turunan Flavonol terhadap Sisi Aktif DAPK 1	20
IV.1.1 Kuersetin	20
IV.1.2 Kaemferol	22
IV.1.3 Fisetin	23
IV.1.4 molekul A	24
IV.1.5 molekul B	25
IV.1.6 molekul C	26
IV.1.7 Perbandingan hasil docking flavonol dengan DAPK 1	27
IV.2 Pemodelan Simulasi Dinamika Molekular untuk Ligand-Protein	29
IV.3 Kestabilan Kompleks Flavonol Selama Simulasi	30
IV.3.1 Kuersetin	30

IV.3.2 Kaemferol	31
IV.3.3 Fisetin	32
IV.3.4 molekul A	33
IV.3.5 molekul B	34
IV.3.6 molekul C	34
IV.3.7 Perbandingan kestabilan kompleks flavonol	35
IV.4 Kelimpahan Ikatan Hidrogen dari Kompleks Flavonol Selama Simulasi	36
IV.4.1 Kuersetin	36
IV.4.2 Kaemferol	38
IV.4.3 Fisetin	39
IV.4.4 molekul A	40
IV.4.5 molekul B	41
IV.4.6 molekul C	43
IV.4.7 Perbandingan Ikatan Hidrogen Flavonol dengan DAPK 1	44
IV.5 Energi Bebas Solvasi Kompleks Flavonol	45
IV.6 Pemilihan Molekul Rekomendasi	46
IV.7 Analisis Retrosintesis	49
IV.7.1 Analisis retrosintesis molekul rekomendasi	49
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	52
V.1 Kesimpulan	52
V.2 Saran	52
DAFTAR PUSTAKA	53
LAMPIRAN	57