

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN	xi
INTISASI	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Rumusan Masalah	3
I.3 Tujuan Penelitian	4
I.4 Manfaat Penelitian	4
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Senyawa quercetin	5
II.1.2 Senyawa kaempferol	6
II.1.3 Protein reseptor <i>tyrosine kinase</i>	7
II.1.4 <i>Docking molecular</i>	8
II.1.5 Simulasi dinamika molekular	9
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	11
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	11
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	11
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	11
II.2.4 Rancangan penelitian	12
BAB III METODE PENELITIAN	13
III.1 Bahan Penelitian	13
III.2 Alat Penelitian	13

III.3	Prosedur Penelitian	13
III.3.1	<i>Redocking</i> senyawa quercetin	13
III.3.2	<i>Docking</i> senyawa kaempferol	14
III.3.3	Simulasi dinamika molekular quercetin dan kaempferol dalam air	14
III.3.4	Simulasi dinamika molekular kompleks quercetin- <i>tyrosine kinase</i> dan kompleks kaempferol- <i>tyrosine kinase</i> dalam air	15
BAB IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	16
IV.1	<i>Redocking</i> Senyawa Quercetin	16
IV.2	<i>Docking</i> Senyawa Kaempferol	18
IV.3	Perbandingan Struktur Hasil <i>Docking</i> Quercetin dan Kaempferol	20
IV.4	Perbandingan Simulasi Dinamika molekular Quercetin dan Kaempferol dalam Air	21
IV.5	Perbandingan Simulasi Dinamika molekular Kompleks Quercetin- <i>Tyrosine Kinase</i> dan Kompleks Kaempferol- <i>Tyrosine Kinase</i> dalam Air	25
IV.6	Perbandingan Energi Bebas Solvasi Kompleks Quercetin- <i>Tyrosine Kinase</i> dan Kompleks Kaempferol- <i>Tyrosine Kinase</i> dalam Air	40
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	42
V.1	Kesimpulan	42
V.2	Saran	42
	DAFTAR PUSTAKA	43
	LAMPIRAN	47

## DAFTAR TABEL

Tabel IV.1	Data energi ikat dan RMSD senyawa quercetin	16
Tabel IV.2	Data energi ikat senyawa kaempferol	18
Tabel IV.3	Data energi bebas senyawa quercetin dan kaempferol	23
Tabel IV.4	Data energi bebas kompleks quercetin- <i>tyrosine kinase</i> dan kompleks kaempferol- <i>tyrosine kinase</i>	39
Tabel IV.5	Data perbandingan energi bebas	40

## DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1	Struktur quercetin	6
Gambar II.2	Struktur kaempferol	6
Gambar II.3	Struktur kristal protein <i>tyrosine kinase</i>	7
Gambar IV.1	(A) Quercetin sebelum <i>diredocking</i> (B) quercetin setelah <i>diredocking</i>	16
Gambar IV.2	Ikatan hidrogen quercetin terhadap MET 258 dan ALA 192	17
Gambar IV.3	Ikatan hidrogen kaempferol terhadap MET 258, GLU 256, dan ASP 321	18
Gambar IV.4	Perbandingan struktur quercetin (A) dan kaempferol (B) ketika <i>docking</i>	19
Gambar IV.5	(a) kotak simulasi quercetin (b) kotak simulasi kaempferol dalam air	20
Gambar IV.6	Energi minimisasi (a) quercetin (b) kaempferol	21
Gambar IV.7	Energi total (a) quercetin (b) kaempferol selama simulasi 4000 ps	22
Gambar IV.8	Kotak simulasi (a) kompleks quercetin- <i>tyrosine kinase</i> 24 (b) kompleks kaempferol- <i>tyrosine kinase</i> dalam air	
Gambar IV.9	Energi minimisasi (a) kompleks quercetin- <i>tyrosine kinase</i> (b) kompleks kaempferol- <i>tyrosine kinase</i>	25
Gambar IV.10	Energi total (a) kompleks quercetin- <i>tyrosine kinase</i> (b) kompleks kaempferol- <i>tyrosine kinase</i> selama simulasi 4000 ps	26
Gambar IV.11	Grafik (a) RDF H30-OMET 258 dan (b) RDF HAC-OMET 258	27
Gambar IV.12	Visualisasi struktur H30-OMET 258 dengan jarak (a) 0,52 nm, (b) 0,41 nm dan (c) HAC-OMET 258 dengan jarak 0,32 nm	28
Gambar IV.13	Dinamika (a) H30-OMET 258 (b) HAC-OMET 258	29
Gambar IV.14	Grafik (a) RDF O30-HMET 258 dan (b) RDF OAD-HMET 258	30
Gambar IV.15	Visualisasi struktur (a) O30-OMET 258 berjarak 0,55 nm	31

(b) O30-OMET 258 berjarak 0,32 nm (c) OAD-OMET 258  
berjarak 0,30 nm

Gambar IV.16 Dinamika (a) O30-OMET 258 (b) OAD-OMET 258

32

Gambar IV.17 Grafik RMSD (a) kompleks quercetin-tyrosine kinase 33  
(b) kompleks kaempferol-tyrosine kinase

Gambar IV.17 Grafik (a) RDF H24-OALA 192 dan (b) grafik dinamika 34  
H24-OALA 192

Gambar IV.18 Visualisasi struktur (a) H24-OALA 192 berjarak 0,52 nm 35  
(b) H24-OALA 192 berjarak 0,34 nm

Gambar IV.19 Grafik RDF HAB-OGLU 256 dan grafik dinamika 35  
HAB-OGLU 256

Gambar IV.20 Visualisasi struktur (a) HAB-OGLU 256 berjarak 0,41 nm 36  
(b) HAB-OGLU 256 berjarak 0,31 nm

Gambar IV.21 Grafik RDF HAF-OASP 321 dan grafik dinamika 37  
HAF-OASP 321

Gambar IV.22 Visualisasi struktur (a) HAF-OASP 321 berjarak 0,60 nm 38

## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Perintah simulasi	46
Lampiran 2. Grafik temperatur senyawa dan kompleks	50
Lampiran 3. Grafik densitas senyawa dan kompleks	50