

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	i
LEMBAR PERNYATAAN.....	ii
LEMBAR PERSEMBAHAN.....	iii
PRAKATA.....	iv
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR TABEL.....	viii
DAFTAR GAMBAR.....	ix
DAFTAR LAMPIRAN.....	xii
DAFTAR PUBLIKASI.....	xiii
INTISARI.....	xiv
ABSTRACT.....	xv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Perumusan Masalah.....	8
1.3 Kebaruan Penelitian.....	8
1.4 Tujuan Penelitian.....	11
1.5 Manfaat Penelitian.....	11
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	12
2.1 Obat dan Senyawa Antikanker.....	12
2.2 Senyawa Xanton.....	15
2.3 Kajian QSAR.....	19
2.4 <i>Docking</i> Molekul.....	20
2.5 Target Kerja Antikanker.....	21
2.6 Antioksidan.....	24
BAB III LANDASAN TEORI, HIPOTESIS, DAN RANCANGAN PENELITIAN.....	27
3.1 Landasan Teori.....	27
3.1.1 Desain senyawa obat dengan pendekatan QSAR.....	27
3.1.2 <i>Docking</i> molekul.....	32
3.1.3 Siklisasi pembentukan hidroksixanton.....	33
3.1.4 Reaksi halogenasi.....	35
3.1.5 Uji aktivitas antikanker.....	39
3.1.6 Aktivitas antioksidan.....	42
3.2 Hipotesis.....	44
3.3 Rancangan penelitian.....	47
BAB IV METODOLOGI PENELITIAN.....	49
4.1 Bahan Penelitian.....	49
4.1.1 Bahan untuk penelitian komputasi.....	49
4.1.2 Bahan untuk sintesis senyawa turunan xanton (HX 1-11).....	49
4.1.3 Bahan untuk uji aktivitas antikanker dan antioksidan.....	49
4.2 Peralatan Penelitian.....	
4.2.1 Peralatan untuk penelitian komputasi.....	50

4.2.2	Peralatan untuk sintesis senyawa turunan xanton	50
4.2.3	Peralatan untuk uji aktivitas antikanker dan antioksidan	50
4.3	Prosedur Penelitian.....	52
4.3.1	Analisis QSAR	52
4.3.2	<i>Docking</i> molekul.....	53
4.3.3	Sintesis senyawa hasil rekomendasi	55
4.3.4	Uji aktivitas antikanker senyawa hasil sintesis.....	59
4.3.5	Uji aktivitas antioksidan senyawa hasil sintesis	60
BAB V	HASIL DAN PEMBAHASAN	61
5.1	Analisis QSAR	61
5.1.1	Validasi metode kalkulasi orbital molekul.....	61
5.1.2	Penyusunan dan pemilihan model QSAR.....	64
5.1.3	Desain senyawa usulan	69
5.2	<i>Docking</i> Molekul	70
5.2.1.	Validasi metode <i>docking</i>	72
5.2.2.	Interaksi senyawa HX 1-3 dan HX 6-11 dengan asam amino protein tirosin kinase (1T46.pdb)	73
5.3	Sintesis siklisasi senyawa hidroksixanton HX 1-5	83
5.3.1.	Sintesis senyawa HX-1 (1,3-dihidroksixanton).....	85
5.3.2.	Sintesis senyawa HX-2 (1,3,6-trihidroksixanton)	88
5.3.3.	Sintesis senyawa HX-3 (3,6-dihidroksixanton).....	92
5.3.4.	Sintesis senyawa HX-4 (3,5,6,7-tetrahidroksixanton)	95
5.3.5.	Sintesis senyawa HX-5 (1,3,5,6,7-pentahidroksixanton)	99
5.4	Sintesis senyawa turunan hidroksixanton.....	102
5.4.1.	Sintesis senyawa HX-6, HX-8 dan HX-10	102
5.4.2.	Sintesis senyawa HX-7, HX -9 dan HX -11	116
5.4	Uji aktivitas antikanker.....	127
5.5	Uji aktivitas antioksidan	131
5.6	Evaluasi aktivitas antikanker.....	136
BAB VI	KESIMPULAN DAN SARAN	140
6.1	Kesimpulan.....	140
6.2	Saran	141
	DAFTAR PUSTAKA	143
	LAMPIRAN.....	161