

DAFTAR ISI

LEMBAR PERSETUJUAN	ii
LEMBAR PENGESAHAN.....	iii
LEMBAR PERNYATAAN.....	iv
KATA PENGANTAR	v
ABSTRAK.....	vii
ABSTRACT.....	vii
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL.....	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah.....	4
1.3 Tujuan Penelitian	4
1.4 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Temu Kunci	5
2.2 Kanker Serviks.....	7
2.3 Jalur Induksi Kanker Serviks	8
2.4 Reseptor BCL-2 (BCL-2)	9
2.5 Inhibitor BCL-2 (BCL-2).....	9
2.6 Flavonoid	10
2.7 <i>Rational Drug Design</i>	11
2.8 Penambatan Molekuler (<i>Molecular Docking</i>)	12
2.9 <i>Protein Data Bank</i> (PDB).....	13
2.10 Farmakokinetik dan Toksisitas	13
2.11 Doxorubicin	13
2.12 <i>Molecular Dynamic</i>	14
2.13 Hasil Penelitian Yang Relevan	14
BAB III METODE PENELITIAN.....	19
3.1 Jenis dan Rancangan Penelitian	19
3.2 Sampel	19
3.3 Bahan Penelitian	22
3.4 Alat Penelitian.....	22
3.5 Lokasi Penelitian dan Waktu Penelitian	22
3.6 Prosedur Penelitian	22
3.7 Diagram Penelitian	28
3.8 Analisis Data.....	28
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	29
4.1 <i>Molecular Docking</i>	29

4.2 <i>Molecular Dynamic</i>	53
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	58
DAFTAR PUSTAKA	59
LAMPIRAN	68
RIWAYAT PENULIS	96



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Rimpang Temu Kunci	5
Gambar 3.1 Struktur Senyawa Flavonoid	21
Gambar 3.2 Diagram Alir Penelitian	28
Gambar 4.1 Struktur <i>BCL-2</i> (4AQ3)	34
Gambar 4.2 <i>Plot Ramachandran</i> Struktur <i>BCL-2</i> (4AQ3)	36
Gambar 4.3 Hasil <i>Overall Quality Factor</i> ERRAT 4AQ3	37
Gambar 4.4 Struktur Overlay Struktur Ligan Alami 4AQ3.....	45
Gambar 4.5 Hasil Visualisasi 2D dan 3D	50
Gambar 4.6 Grafik Nilai RMSD Hasil Simulasi <i>Molecular Dynamic</i>	54
Gambar 4.7 Grafik Nilai RMSF Hasil Simulasi <i>Molecular Dynamic</i>	55
Gambar 4.8 Grafik Protein RMSF dan Kontak Residu	57
Gambar 4.9 Kontak Ligan 4AQ3 dengan Protein Hasil Molecular	57



DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Hasil Penelitian Yang Relevan	15
Tabel 4.1 Hasil Preparasi Senyawa Flavonoid	29
Tabel 4.2 Data Profil Reseptor	34
Tabel 4.3 Statistik <i>Plot Ramachandran</i>	35
Tabel 4.4 Hasil Studi Toksisitas	38
Tabel 4.5 Hasil Studi Farmakokinetik	40
Tabel 4.6 Hasil Uji Toksisitas Senyawa Flavonoid	43
Tabel 4.7 Validasi Penambatan Molekul	44
Tabel 4.8 Hasil Penambatan Molekul Reseptor 4AQ3	46
Tabel 4.9 Hasil Visualisasi Penambatan <i>Molekuler Docking</i>	47
Tabel 4.10 Hasil Studi <i>Lipinski's Rule Of Five</i>	51
Tabel 4.11 Nilai Rata-Rata, Minimum, dan Maksimum RMSD	54
Tabel 4.12 Nilai Rata-Rata, Minimum, dan Maksimum RMSF	56



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1.1 Preparasi Ligan Senyawa Flavonoid	68
Lampiran 2.1 Reseptor 4AQ3	69
Lampiran 3.1 Preparasi Reseptor 4AQ3	70
Lampiran 4.1 Prediksi <i>pKCSM</i> Naringin	71
Lampiran 4.2 Prediksi <i>pKCSM</i> Rubranine	72
Lampiran 4.3 Prediksi <i>pKCSM</i> Boesenbergin B	73
Lampiran 4.4 Prediksi <i>pKCSM</i> Panduratin A	74
Lampiran 4.5 Prediksi <i>pKCSM</i> Panduratin C	75
Lampiran 5.1 Visualisasi Hasil <i>Docking</i>	76
Lampiran 6.1 Studi <i>Lipinski's</i> Naringin	77
Lampiran 6.2 Studi <i>Lipinski's</i> Rubranine	78
Lampiran 6.3 Studi <i>Lipinski's</i> Panduratin A	79
Lampiran 6.4 Studi <i>Lipinski's</i> Panduratin C	80
Lampiran 6.5 Studi <i>Lipinski's</i> Boesenbergin B	81
Lampiran 7.1 Simulasi <i>Molecular Dynamic</i>	82

