

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	i
KATA PENGANTAR.....	ii
DAFTAR ISI	iv
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR LAMPIRAN	viii
ABSTRAK	viix
<i>ABSTRACT</i>	x
BAB I PENDAHULUAN.....	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	4
II.1. Kanker Payudara	4
II.2. <i>Human Epidermal Growth Factor Receptor 2 (HER2)</i>	5
II.3. Inhibisi Tirosin Kinase	5
II.4. Sisi Aktif HER2	7
II.5. Lapatinib	7
II.6. Cyanidin dan Peonidin-3-Glukosida	8
II.7. Simulasi Dinamika Molekuler	9
II.8. <i>Root Mean Square Deviation (RMSD)</i>	10
II.9. Jari-Jari Girasi	11
II.10. Energi Interaksi	12
BAB III METODE PENELITIAN.....	14
III.1. Waktu dan Tempat Penelitian.....	14
III.2. Alat dan Bahan.....	14
III.2.1 Alat.....	14
III.2.2 Bahan.....	15
III.3. Prosedur Kerja.....	15
III.3.1. Preparasi dan Validasi Struktur 3-Dimensi Protein.....	15
III.3.2. Preparasi dan Validasi Struktur 3-Dimensi Ligan.....	16

III.3.3.	Konfirmasi <i>Molecular Docking</i>	16
III.3.4.	<i>Molecular Dynamic</i>	17
III.3.4.1.	Penambahan Pelarut (Solvasi).....	17
III.3.4.2.	Pemberian Ion	17
III.3.4.3.	Minimisasi Energi	18
III.3.4.4.	Ekuilibrasi	18
III.3.4.5.	Produksi <i>Molecular Dynamics</i>	19
III.3.4.6.	Analisis Hasil	19
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....		21
IV.1.	Preparasi dan Validasi Protein dan Ligan.....	21
IV.1.1.	Preparasi dan Validasi Struktur 3D Protein.....	21
IV.1.2.	Preparasi dan Validasi Ligan.....	23
IV.2.	Konfirmasi Posisi dan Orientasi Ligan pada Sisi Pengikatan Protein....	25
IV.3.	Preparasi Simulasi <i>Molecular Dynamics</i>	26
IV.3.1.	Pembuatan Topologi Protein dan Ligan	26
IV.3.2.	Penambahan Pelarut dan Penambahan Ion	27
IV.3.3.	Minimisasi Energi	28
IV.3.4.	Ekuilibrasi	29
IV.3.5.	Tahap Produksi Simulasi <i>Molecular Dynamics</i>	31
IV.4.	Analisis Hasil Simulasi <i>Molecular Dynamics</i> : Kestabilan Konformasi Kompleks Protein-Ligan	31
IV.4.1.	<i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD) Protein.....	31
IV.4.2.	<i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD) Ligan.....	33
IV.4.3.	Jari-Jari Girasi	35
IV.5.	Analisis Hasil Simulasi <i>Molecular Dynamics</i> : Kekuatan Interaksi Kompleks Protein-Ligan	36
IV.5.1.	Energi Interaksi	36
IV.5.2.	Residu dan Gugus Penentu Interaksi	39
BAB V PENUTUP.....		44
V.1.	Kesimpulan	44
V.2.	Saran.....	44
DAFTAR PUSTAKA		45
LAMPIRAN.....		51