

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN PENGESAHAN .....</b>	<b>ii</b>
<b>PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI .....</b>	<b>iii</b>
<b>PRAKATA .....</b>	<b>iv</b>
<b>DAFTAR ISI.....</b>	<b>v</b>
<b>DAFTAR GAMBAR.....</b>	<b>viii</b>
<b>DAFTAR TABEL .....</b>	<b>x</b>
<b>INTISARI .....</b>	<b>xi</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>xii</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN .....</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang.....	1
I.2 Tujuan Penelitian .....	3
I.3 Manfaat Penelitian .....	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS .....</b>	<b>5</b>
II.1 Tinjauan Pustaka .....	5
II.1.1 Malaria.....	5
II.1.2 Falcipain-2 dan Falcipain-3 .....	6
II.1.3 Kalkon .....	8
II.1.4 Optimasi geometri .....	9
II.1.5 Penambatan molekul .....	11
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian.....	12
II.2.1 Perumusan hipotesis 1 .....	12
II.2.2 Perumusan hipotesis 2. ....	12
II.2.3 Rancangan penelitian.....	13
<b>BAB III METODE PENELITIAN .....</b>	<b>14</b>
III.1 Alat.....	14
III.2 Bahan.....	14
III.3 Metode Penelitian.....	17
III.3.1 Validasi metode optimasi geometri ligan.....	17
III.3.2 Penambatan molekul .....	17
III.3.3 Analisis ADME .....	18

<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	19
IV.1 Validasi Metode Optimasi Geometri Ligan	19
IV.2 Penambatan Molekul Ulang Ligan Standar	20
IV.2.1 Penambatan molekul ulang Falcipain-2	20
IV.2.2 Penambatan molekul ulang Falcipain-3	22
IV.3 Penambatan Molekul Ligan Usulan	24
IV.3.1 Penambatan molekul terhadap Falcipain-2	24
A. Penambatan molekul senyawa kalkon 1	24
B. Penambatan molekul senyawa kalkon 2	25
C. Penambatan molekul senyawa kalkon 3	26
D. Penambatan molekul senyawa kalkon 4	28
E. Penambatan molekul senyawa kalkon 5	29
F. Penambatan molekul senyawa kalkon 6	30
G. Penambatan molekul senyawa kalkon 7	31
H. Penambatan molekul senyawa kalkon 8	32
I. Penambatan molekul senyawa kalkon 9	33
J. Perbandingan hasil penambatan molekul terhadap falcipain-2	34
IV.3.2 Penambatan molekul terhadap Falcipain-3	36
A. Penambatan molekul senyawa kalkon 1	36
B. Penambatan molekul senyawa kalkon 2	37
C. Penambatan molekul senyawa kalkon 3	38
D. Penambatan molekul senyawa kalkon 4	40
E. Penambatan molekul senyawa kalkon 5	41
F. Penambatan molekul senyawa kalkon 6	42
G. Penambatan molekul senyawa kalkon 7	43
H. Penambatan molekul senyawa kalkon 8	44
I. Penambatan molekul senyawa kalkon 9	45
J. Perbandingan hasil penambatan molekul terhadap falcipain-3	46
IV.4 Analisis Retrosintesis senyawa kalkon 3 dan kalkon 7	48
IV.5 Analisis ADME	50
IV.5.1 Analisis ADME senyawa kalkon 3	50

IV.5.2 Analisis ADME senyawa kalkon 7 .....	51
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN .....</b>	<b>53</b>
V.1 Kesimpulan .....	53
V.2 Saran.....	53
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>54</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>59</b>