

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
DISERTASI	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iv
HALAMAN MOTO	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
DAFTAR ISTILAH	xiii
DAFTAR PUBLIKASI	xiv
INTISARI	xv
ABSTRACT	xvi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	5
I.2.1 Tujuan umum	5
I.2.2 Tujuan khusus	6
I.3 Manfaat Penelitian	6
I.4 Keaslian Penelitian	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	9
II.1 Tinjauan Pustaka	9
II.1.1 Histamin	9
II.1.2 Reseptor histamin	10
II.1.3 Reseptor histamin H ₄ manusia	13
II.1.4 Ligan reseptor histamin H ₄	16
II.1.6 Kimia komputasi	22
II.1.7 Penambatan molekul	24
II.1.8 Simulasi dinamika molekul	25
II.1.9 <i>Structure-based virtual screening</i> (SBVS).....	27
II.2 Perumusan Hipotesis	31
II.3 Rancangan Penelitian	32
BAB III METODE PENELITIAN	34
III.1 Bahan dan Alat Penelitian.....	34
III.1.1 Bahan penelitian.....	34
III.1.2 Alat penelitian	34
III.2 Prosedur Penelitian.....	35
III.2.1 Pemodelan homologi hHRH ₄	35
III.2.2 Penambatan ligan hHRH ₄ pada reseptor homologi.....	35
III.2.3 Simulasi dinamika molekuler kompleks ligan-hHRH ₄	36
III.2.4 Validasi internal kompleks-hHRH ₄	37
III.2.5 Validasi retrospektif dan optimasi protokol SBVS.....	37
III.2.6 <i>Virtual screening</i> senyawa bahan alam.....	39

III.3 Skema penelitian	40
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN.....	41
IV.1 Pemodelan homologi hHRH ₄	41
IV.2 Penambatan ligan hHRH ₄	45
IV.2.1 Pemodelan 3D ligan hHRH ₄	45
IV.2.2 Penambatan ligan hHRH ₄	46
IV.3 Simulasi dinamika molekuler kompleks ligan-hHRH ₄	49
IV.3.1 Simulasi dinamika molekuler	49
IV.3.2 Analisis hasil dinamika molekuler.....	52
IV.3.3 Analisis RMSD	53
IV.3.4 Analisis energi ikatan.....	54
IV.4 Validasi internal kompleks ligan-hHRH ₄	57
IV.5 Validasi retrospektif dan optimasi protokol SBVS.....	60
IV.5.1 Pembuatan dan <i>screening</i> data set retrospektif.....	60
IV.5.2 Pembuatan data set <i>decoys</i>	62
IV.5.3 Validasi retrospektif model homologi hHRH ₄	63
IV.5.4 Optimasi protokol structure-based virtual screening (SBVS).....	64
IV.6 <i>Virtual screening</i> senyawa bahan alam.....	69
BAB V KESIMPULAN	78
V.1 Kesimpulan	78
V.2 Saran.....	79
DAFTAR PUSTAKA	81
LAMPIRAN.....	94