

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PERSETUJUAN.....	i
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	ii
PRAKATA.....	iii
DAFTAR ISI.....	iv
DAFTAR TABEL	vi
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR LAMPIRAN.....	ix
DAFTAR SINGKATAN	x
DAFTAR PUBLIKASI.....	xi
INTISARI.....	xii
ABSTRACT.....	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Perumusan Masalah.....	4
I.3 Keaslian Penelitian	5
I.4 Tujuan Penelitian.....	8
I.4.1 Tujuan umum	8
I.4.2 Tujuan khusus.....	9
I.5 Manfaat Penelitian.....	9
I.5.1 Manfaat bagi kepentingan umum	9
I.5.2 Manfaat bagi kepentingan akademik	10
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	10
II.1 Tinjauan Pustaka.....	10
II.1.1 Malaria	10
II.1.2 Enzim <i>PfDHFR</i>	12
II.1.3 Resistensi antimalaria	13
II.1.4 Senyawa turunan kuinazolina	16
II.1.5 Desain obat berbantuan komputer.....	20
II.1.6 Konsep kimia komputasi dalam desain molekul obat.....	23
II.1.7 Analisis HKSA-2D	24
II.1.8 Analisis HKSA-3D	29
II.1.9 Prediksi ADME, <i>drug-likeness</i> dan toksisitas.....	30
II.1.10 Penambatan molekul	33
II.1.11 Simulasi dinamika molekul.....	39
II.2 Perumusan Hipotesis	42
II.3 Rancangan Penelitian	45
BAB III METODE PENELITIAN.....	48
III.1 Bahan Penelitian.....	48
III.2 Peralatan Penelitian	50
III.3 Prosedur Penelitian.....	51
III.3.1 Analisis HKSA-2D	51
III.3.2 Analisis HKSA-3D	52

III.3.3	Penambatan molekul	53
III.3.4	Simulasi MD	54
III.3.5	Prediksi ADME, <i>drug-likeness</i> dan toksisitas	55
BAB IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	57
IV.1	Hasil Analisis HKSA-2D.....	57
IV.1.1	Penentuan metode optimasi geometri.....	57
IV.1.2	Penentuan <i>dataset</i> , deskriptor dan akurasi model	59
IV.1.3	<i>Applicability domain</i> HKSA.....	62
IV.1.4	Pengembangan model HKSA.....	63
IV.2	Hasil Analisis HKSA-3D.....	73
IV.3	Hasil Analisis Penambatan Molekul.....	79
IV.4	Hasil Simulasi MD	84
IV.5	Hasil Prediksi ADME, <i>Drug-likeness</i> dan Toksisitas.....	91
IV.6	Retrosintesis.....	96
BAB V	KESIMPULAN	99
V.1	Kesimpulan	99
V.2	Saran	100
DAFTAR PUSTAKA		101
LAMPIRAN		112