

## DAFTAR ISI

PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vi
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR LAMPIRAN	viii
INTISARI	ix
ABSTRACT	x
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Polimer tercetak molekul	5
II.1.2 Rancangan MIP berbantuan komputer	6
II.1.3 Mekanika kuantum pada rancangan MIP	7
II.1.4 Formulasi optimal untuk MIP	9
II.1.5 Simulasi dinamika molekul	10
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
BAB III METODE PENELITIAN	14
III.1 Materi Penelitian	14
III.2 Alat	14
III.3 Prosedur Penelitian	14
III.3.1 Optimasi geometri molekul	14
III.3.2 Pemodelan MIP	15
III.3.3 Simulasi dinamika molekul	16
III.3.4 Analisis trayektori	16
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	18
IV.1 Analisis Hasil Pemodelan MIP Artemisinin	18
IV.2 MIP dalam Simulasi Dinamika Molekul	26
IV.3 Analisis Hasil Dinamika Molekul	30
IV.3.1 Analisis ikatan hidrogen	30
IV.3.2 Analisis <i>radial distribusi function</i>	35
IV.4 Analisis Rasio Optimum MIP Artemisinin	38
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	40
V.1 Kesimpulan	40
V.2 Saran	40
DAFTAR PUSTAKA	41
LAMPIRAN	45