

DAFTAR ISI

PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR SINGKATAN/ISTILAH	ix
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR LAMPIRAN	xvi
INTISARI	xvii
ABSTRACT	xviii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Permasalahan	6
I.3 Keaslian dan Kebaruan	6
I.4 Tujuan Penelitian	7
I.5 Manfaat Penelitian	8
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	9
II.1 Antimalaria	9
II.2 Senyawa 1,6-dihidro-1,3,5-triazin-2,4-diamin dan Turunannya	10
II.3 Pencarian Senyawa Baru Anti Malaria	11
II.4 Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas	14
II.4.1 Pengembangan Model HKSA	16
II.4.2 Validasi model HKSA	16
II.4.3 Metrika validasi	17
II.4.4 Aplikasi Model HKSA	19
II.5 <i>Molecular Docking</i>	20
II.6 Aplikasi <i>Docking</i> untuk Penemuan Obat	20
II.7 Simulasi Dinamika Molekul	22
II.7.1 Algoritma dinamika molekul	24
II.7.2 Syarat batas	27
II.8 <i>Molecular Mechanics Poisson-Boltzmann Surface Area</i>	28
II.8.1 Model-model solvasi	32
II.8.2 Aplikasi MM-PBSA	34
BAB III LANDASAN TEORI, HIPOTESIS DAN RANCANGAN PENELITIAN	36
III.1 Landasan Teori	36
III.2 Hipotesis	38
III.3 Rancangan Penelitian	40

BAB IV METODE PENELITIAN	43
IV.1 Bahan dan Alat Penelitian	43
IV.1.1 Perangkat keras	43
IV.1.2 Perangkat lunak	43
IV.1.3 Bahan kajian	44
IV.2 Prosedur Penelitian	45
IV.2.1 Hubungan kuantitatif antara struktur dan aktivitas	45
IV.2.2 <i>Molecular docking</i>	47
IV.2.3 Simulasi dinamika molekul	49
IV.3 Bagan Alir Penelitian	51
BAB V HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	53
V.1 Hubungan Kuantitatif antara Struktur dan Aktivitas	53
V.1.1 Persiapan ligan	53
V.1.2 Validasi <i>basis set</i> dan perhitungan orbital molekul	53
V.1.3 Penyusunan model HKSA	55
V.2 <i>Molecular Docking</i>	64
V.2.1 Persiapan struktur protein	66
V.2.2 Persiapan ligan	67
V.2.3 Persiapan reseptor	67
V.2.4 Validasi parameter <i>docking</i>	73
V.2.5 <i>Docking</i> ligan kandidat	73
V.3 Simulasi Dinamika Molekul	82
V.3.1 Penyiapan topologi ligan	82
V.3.2 Penyiapan topologi reseptor	83
V.3.3 Penyiapan topologi kompleks	83
V.3.4 Tahap penyeimbangan larutan kompleks	84
V.3.5 Analisis kelayakan sistem	85
V.3.6 Tahap produksi	90
V.3.7 Analisis ikatan hidrogen	98
V.3.8 Analisis afinitas ligan-reseptor	104
V.3.9 Penghitungan MM-PBSA	105
V.3.10 Prediksi Parameter Lipinski Senyawa Kandidat	107
V.3.11 Usulan kriteria senyawa antimalaria	108
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN	109
VI.1 Kesimpulan	109
VI.2 Saran	109
DAFTAR PUSTAKA	111