

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	i
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	ii
<b>PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI</b>	iii
<b>PRAKATA</b>	iv
<b>DAFTAR ISI</b>	v
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	vii
<b>DAFTAR TABEL</b>	viii
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	ix
<b>INTISARI</b>	x
<b>ABSTRACT</b>	xi
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	6
I.3 Manfaat Penelitian	6
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	7
II.1 Tinjauan Pustaka	7
II.1.1 Kanker	7
II.1.2 Kimia komputasi	8
II.1.3 Metode kimia komputasi	9
II.1.4 Antrapirazon	11
II.1.5 Analisis QSAR	11
II.1.6 Deskriptor dalam QSAR	12
II.1.7 Analisis statistik dalam QSAR	13
II.1.8 Metode QSAR	16
II.1.9 Desain senyawa obat	17
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	20
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	20
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	20
II.2.3 Rancangan penelitian	21
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	22
III.1 Alat dan Bahan Penelitian	22
III.1.1 Alat penelitian	22
III.1.2 Bahan penelitian	22
III.2 Prosedur Penelitian	24
III.2.1 Metode perhitungan	24
III.2.2 Optimasi geometri	24
III.2.3 Perhitungan deskriptor	25
III.2.4 Penyusunan model QSAR	25
III.2.5 Validasi model QSAR	25
III.2.6 Desain senyawa obat	26
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	27
IV.1 Menentukan Metode Perhitungan Komputasi	27
IV.2 Optimasi Geometri	29



UNIVERSITAS  
GADJAH MADA

**Studi QSAR dan Desain Senyawa Turunan Antrapirazon Baru sebagai Agen Antikanker**  
MOH SYAIFUDIN, Prof. Dr. rer.nat. Harno Dwi Pranowo, M.Si.; Dr. Deni Pranowo, S.Si., M.Si.  
Universitas Gadjah Mada, 2019 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

IV.3 Penentuan <i>Training</i> dan <i>Test Set</i>	30
IV.4 Perhitungan Deskriptor	32
IV.5 Analisis QSAR	34
IV.6 Desain Senyawa Baru	37
IV.7 Analisis Retrosintesis	39
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	42
V.1 Kesimpulan	42
V.2 Saran	42
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	43
<b>LAMPIRAN</b>	47