

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
SURAT PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
INTISARI	x
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Pengobatan malaria	5
II.1.2 Senyawa kalkon	7
II.1.3 Hubungan kuantitatif struktur-aktivitas	9
II.1.4 Validasi persamaan HKSA	11
II.1.5 Density functional theory (DFT)	13
II.1.6 Optimasi geometri	15
II.1.7 Penambatan molekuler	16
II.1.8 Plasmodium falciparum dihidroorotat dehidrogenase (pfDHODH)	17
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	19
II.2.1 Perumusan hipotesis I	19
II.2.2 Perumusan hipotesis II	19
II.2.3 Perumusan hipotesis III	20
II.2.4 Rancangan Penelitian	20
BAB III METODE PENELITIAN	22
III.1 Alat Penelitian	22
III.2 Bahan Penelitian	22
III.3 Prosedur Penelitian	24
III.3.1 Pemilihan himpunan basis dan validasi metode	24
III.3.2 Perhitungan deskriptor elektronik dan molekuler	24
III.3.3 Analisis dan pemilihan model HKSA	25
III.3.4 Desain senyawa turunan kalkon	26
III.3.5 Penambatan molekuler terhadap pfDHODH	26
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	28
IV.1 Pemilihan Himpunan Basis dan Validasi Metode	28
IV.2 Perhitungan Deskriptor Elektronik dan Molekuler	32
IV.3 Analisis dan Pemilihan Model HKSA	34

IV.4 Desain Senyawa Usulan Turunan Kalkon	41
IV.5 Penambatan Molekuler Senyawa Usulan	46
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	54
V.1 Kesimpulan	54
V.2 Saran	54
DAFTAR PUSTAKA	55
LAMPIRAN	61