

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iv
KATA PENGANTAR	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	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Senyawa metronidasol	4
II.1.2 Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA)	5
II.1.3 Validasi metode HKSA	7
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	11
II.2.1 Perumusan hipotesis I	11
II.2.2 Perumusan hipotesis II	11
II.2.3 Perumusan hipotesis III	12
II.2.4 Rancangan Penelitian	12
BAB III METODE PENELITIAN	14
III.1 Bahan Penelitian	14
III.2 Alat Penelitian	16
III.3 Prosedur Penelitian	17
III.3.1 Pemilihan metode komputasi	17
III.3.2 Perhitungan deskriptor	17
III.3.3 Pemilihan model HKSA	18

III.3.4 Desain senyawa baru	19
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	20
IV.1 Pemilihan dan Validasi Metode	20
IV.2 Perhitungan Deskriptor	22
IV.3 Deskriptor Analisis Komponen Utama	24
IV.4 Analisis dan Pemilihan Model HKSA menggunakan Regresi Multilinear	27
IV.5 Analisis dan Pemilihan Model HKSA menggunakan Regresi Komponen Utama	29
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	40
DAFTAR PUSTAKA	42
LAMPIRAN	45