

## DAFTAR ISI

Halaman

HALAMAN PERSETUJUAN.....	iii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI.....	iv
PRAKATA .....	v
INTISARI .....	vi
ABSTRACT.....	vii
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR GAMBAR .....	x
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiii
DAFTAR PUBLIKASI.....	xiv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
I.1 Latar Belakang .....	1
I.2 Perumusan Masalah .....	6
I.3 Keaslian Penelitian.....	6
I.4 Tujuan Penelitian .....	7
I.4.1 Tujuan umum.....	7
I.4.2 Tujuan khusus .....	8
I.5 Manfaat Penelitian .....	8
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS .....	9
II.1 Tinjauan Pustaka.....	9
II.1.1 Siklus Hidup HIV .....	9
II.1.2 Enzim Protease HIV .....	10
II.1.3 Protein SP1-Gag .....	12
II.1.4 Asam Betulinat .....	13
II.1.5 Sintesis Senyawa Penghambat Maturasi HIV .....	13
II.1.6 Penggunaan Konsep Kimia Kuantum dalam Perancangan Obat.....	15
II.1.7 Kajian Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA)..	18
II.1.8 Deskriptor Topologi .....	20
II.1.9 Kajian Penambatan Molekul .....	24
II.1.10 Kajian Dinamika Molekul .....	25
II.1.11 Perhitungan Energi Bebas dalam Dinamika Molekul .....	27
II.2.1 Perumusan Hipotesis .....	28
II.2.2 Rancangan Penelitian .....	30
BAB III METODE PENELITIAN.....	32
III.1 Bahan Penelitian .....	32
III.2 Alat Penelitian .....	32
III.3 Prosedur Penelitian .....	32
III.3.1 Pemilihan Metode Optimasi Geometri.....	32
III.3.2 Perhitungan Deskriptor Molekul.....	33

III.3.3	Penyusunan dan Validasi Model HKSA .....	33
III.3.4	Perancangan, Prediksi Aktivitas dan Sitotoksitas Senyawa Baru .....	35
III.3.5	Analisis Penambatan Molekul.....	36
III.3.6	Analisis Interaksi Senyawa Rancangan .....	36
III.3.7	Analisis Dinamika Molekul .....	36
III.3.8	Penghitungan Energi Ikat dengan Metode MM-GBSA .....	37
BAB IV	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN .....	38
IV.1	Optimasi Geometri dan Pemisahan Data.....	38
IV.1.1	Pemilihan Metode Optimasi Geometri .....	38
IV.1.2	Pemisahan Data menjadi <i>Training-set</i> dan <i>Test-set</i> .....	41
IV.2	Perhitungan dan Pemilihan Deskriptor.....	42
IV.3	Penyusunan dan Validasi Model .....	50
IV.3.1	Model Aktivitas Penghambatan Maturasi HIV .....	50
IV.3.2	Model Sitotoksitas .....	55
IV.4	Perancangan Senyawa Baru dan Prediksi Aktivitas.....	58
IV.5	Analisis Interaksi dengan Penambatan Molekul .....	62
IV.5.1	Tahap <i>Redocking</i> .....	62
IV.5.2	Penambatan Senyawa Usulan dan Senyawa Standar.....	66
IV.6	Analisis Stabilitas dengan Dinamika Molekul .....	70
IV.7	Penentuan Energi Ikat dengan Metode MM-GBSA.....	74
IV.8	Kajian Retrosintesis dan Prediksi Tahap Sintesis Senyawa .....	76
BAB V	KESIMPULAN .....	79
V.1	Kesimpulan .....	79
V.2	Saran .....	80
DAFTAR PUSTAKA	.....	81
LAMPIRAN	.....	93