

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
DAFTAR SINGKATAN DAN ISTILAH	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	
I.1 Latar belakang dan permasalahan	1
I.2 Tujuan penelitian	5
I.3 Manfaat penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN HIPOTESIS	
II.1 Tinjauan pustaka	
II.1.1 Metode kimia komputasi	6
II.1.2 Hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas (HKSA)	7
II.1.3 Metode Hansch	8
II.1.4 Metode Free Wilson	9
II.1.5 Metode HKSA 2D	10
II.1.6 Metode <i>ab initio</i> Hartree-Fock	12
II.1.7 Himpunan basis	13
II.1.8 Analisis MLR	13
II.1.9 Analisis HKSA senyawa obat	16
II.1.10 Desain senyawa obat	17
II.1.11 Analisis HKSA senyawa α -mangostin	17
II.1.12 Senyawa antikanker	21
II.2 Perumusan hipotesis dan rancangan penelitian	
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	23
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	24
II.2.3 Rancangan penelitian	24
BAB III METODE PENELITIAN	
III.1 Bahan	26
III.2 Alat	27
III.3 Prosedur	
III.3.1 Validasi himpunan basis	27
III.3.2 Optimasi geometri turunan struktur α -mangostin	28
III.3.3 Perhitungan deskriptor	28
III.3.4 Analisis MLR dan pemilihan persamaan HKSA	29
III.3.5 Validasi model HKSA	30
III.3.6 Desain senyawa baru	30
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	
IV.1 Validasi himpunan basis	32
IV.2 Optimasi geometri turunan struktur α -mangostin	35
IV.3 Perhitungan deskriptor	38

IV.4 Analisis MLR dan pemilihan persamaan HKSA	40
IV.5 Validasi model HKSA	42
IV.6 Desain senyawa baru	44
BAB V KESIMPULAN	
V.1 Kesimpulan	54
V.2 Saran	54
DAFTAR PUSTAKA	55
LAMPIRAN	60