

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
HALAMAN MOTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
INTISARI	x
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang dan Permasalahan	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 Jamur <i>fusarium solani</i>	4
II.1.2 Fungisida	4
II.1.3 Pengembangan fungisida baru	5
II.1.4 Hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas	6
II.1.5 Parameter deskriptor dalam HKSA	10
II.1.6 Analisis statistik dalam HKSA	16
II.1.7 Validasi model HKSA	19
II.1.8 Desain senyawa baru	22
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	23
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	23
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	24
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	24
II.2.4 Rancangan penelitian	25
BAB III METODE PENELITIAN	26
III.1 Bahan Penelitian	26
III.2 Peralatan	27
III.3 Prosedur Penelitian	27
III.3.1 Penentuan metode kimia komputasi	27
III.3.2 Optimasi geometri	28
III.3.3 Perhitungan deskriptor elektronik dan molekuler	28
III.3.4 Pemilihan senyawa <i>training</i> dan <i>test set</i>	28
III.3.5 Analisis HKSA dengan MLR	29
III.3.6 Validasi model MLR	29
III.3.7 Analisis HKSA dengan ANN	29
III.3.8 Validasi model ANN	30
III.3.9 Desain senyawa baru	30

BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	31
IV.1 Penentuan Metode Kimia Komputasi	31
IV.2 Optimasi Geometri	34
IV.3 Hasil Perhitungan Data Deskriptor	36
IV.4 Analisis HKSA Menggunakan MLR	40
IV.5 Validasi Model MLR	44
IV.6 Analisis HKSA Menggunakan ANN	47
IV.7 Validasi Model ANN	48
IV.8 Perbandingan Model HKSA dengan Metode MLR dan ANN	51
IV.9 Analisis Deskriptor Terpilih	52
IV.10 Desain Senyawa Baru	54
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	59
V.1 Kesimpulan	59
V.2 Saran	59
DAFTAR PUSTAKA	60
LAMPIRAN	66