

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
HALAMAN MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang dan Permasalahan	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 Malaria	5
II.1.2 Senyawa turunan 4-aminokuinolin	6
II.1.3 Protein reseptor PfATP6	7
II.1.4 Penambatan molekular (<i>molecular docking</i>)	8
II.1.5 Simulasi dinamika molekular kompleks ligan-protein	9
II.1.6 Simulasi dinamika molekular	10
II.1.7 Analisis <i>Radial Distribution Function</i> (RDF)	12
II.1.8 Potensial AMBER	13
II.1.9 Ikatan hidrogen	14
II.1.10 Model molekul air	14
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	15
II.2.1 Perumusan hipotesis I	15
II.2.2 Perumusan hipotesis II	15
II.2.3 Rancangan penelitian	16
BAB III METODE PENELITIAN	17
III.1 Bahan	17
III.2 Alat	18
III.3 Prosedur Penelitian	18
III.3.1 Penambatan molekular	18
III.3.2 Simulasi dinamika molekular kompleks ligan-protein dalam air	19

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	21
IV.1. Penambatan Protein PfATP6 dengan Ligan KSPP	21
IV.2. Simulasi Dinamika Molekular Kompleks KSPP-PfATP6 dalam Air	24
IV.2.1 Preparasi ligan, protein, dan kompleks KSPP-PfATP6	24
IV.2.2 Simulasi dinamika molekular ligan KSPP-PfATP6	27
IV.2.3 Analisis trajektori	28
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	37
V.1 Kesimpulan	37
V.2 Saran	37
DAFTAR PUSTAKA	38
LAMPIRAN	42