

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
DAFTAR ISTILAH, SINGKATAN, DAN LAMBANG	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 Kimia komputasi dan perkembangannya	5
II.1.2 Analisis QSAR	6
II.1.3 Metode Hansch	7
II.1.4 Metode Free-Wilson	8
II.1.5 Metode QSAR 2D	10
II.1.6 Metode QSAR 3D	12
II.1.7 Penentuan deskriptor	12
II.1.8 Metode semiempirik AM1	14
II.1.9 Analisis MLR	16
II.1.10 Analisis QSAR kalkon	18
II.1.11 Desain senyawa obat	19
II.1.12 Aktivitas antimalaria senyawa kalkon	19
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	22
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	22
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	22
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	23
II.2.4 Rancangan penelitian	23
BAB III METODE PENELITIAN	24
III.1 Bahan	24
III.2 Peralatan	24
III.3 Prosedur	26
III.3.1 Validasi metode	26
III.3.2 Optimasi geometri	26
III.3.3 Perhitungan parameter elektronik	27
III.3.4 Analisis MLR dan pemilihan model persamaan QSAR	27
III.3.5 Desain senyawa baru	28
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	29
IV.1 Validasi Metode	29
IV.2 Optimasi Geometri	37

IV.3 Analisis MLR dan Pemilihan Model Persamaan QSAR	40
IV.4 Desain Senyawa Baru	45
BAB V KESIMPULAN	51
DAFTAR PUSTAKA	52
LAMPIRAN	56