

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN	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	1
I.2 Tujuan	2
I.3 Manfaat	2
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	3
II.1 Tinjauan Pustaka	3
II.1.1 Malaria	3
II.1.2 Protein reseptor PfATP6	4
II.1.3 Senyawa turunan eurikumanon	5
II.1.4 Simulasi dinamika molekular kompleks ligan-protein	6
a. Simulasi dinamika molekular senyawa antipsikotik- protein reseptor D3 dopamin	6
b. Simulasi dinamika molekular senyawa antimalaria- protein PfATP6	6
II.1.5 <i>Molecular docking</i> (penambatan molekular)	7
II.1.6 Simulasi dinamika molekular	8
II.1.7 Perhitungan $\Delta G_{\text{hidrasi}}$ dan ΔG_{ikatan}	10
II.1.8 Metode mekanika molekular	11
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	12
II.2.1 Perumusan Hipotesis	12

II.2.2 Rancangan penelitian	13
BAB III. METODE PENELITIAN	14
III.1 Bahan	14
III.2 Alat	14
III.3 Prosedur Penelitian	15
III.3.1 Penambatan molekul	15
a. Penyiapan protein PfATP6	15
b. Penyiapan struktur ligan DEK	15
c. Penambatan molekular protein PfATP6 dengan ligan	15
III.3.2 Simulasi dinamika molekular ligan dan kompleks protein-ligan dalam air	16
a. Pembuatan kotak simulasi ligan DEK	16
b. Pembuatan kotak simulasi kompleks protein-ligan	16
c. Protokol simulasi	16
BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN	17
IV.1 Penambatan PfATP6 dengan Ligan DEK	17
IV.2 Simulasi Dinamika Molekular Ligan DEK dan Kompleks Protein PfATP6-Ligan dalam Air	20
IV.2.1 Simulasi ligan DEK dalam air	20
IV.2.2 Hidrasi protein PfATP6 dalam air	26
IV.2.3 Simulasi kompleks protein PfATP6-ligan DEK dalam air	27
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN	36
V.1 Kesimpulan	36
V.2 Saran	36
DAFTAR PUSTAKA	37
LAMPIRAN	40