

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
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 Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Malaria	4
II.1.2 Antimalaria dan resistensinya	5
II.1.3 PfATP6	5
II.1.4 Bruseantin	6
II.1.5 Penambatanmolekuler	8
II.1.6 Simulasi dinamika molekuler	10
II.2 Hipotesis	15
Dasar pemikiran 1	15
Hipotesis 1	15
Dasar pemikiran 2	15
Hipotesis 2	15
Dasar pemikiran 3	15
Hipotesis 3	15
II.3Rancangan penelitian	16
BAB III. METODE PENELITIAN	17
III.1 Alat dan Bahan	17
II.1.1 Alat	17
II.1.2Bahan	17
III.2 Prosedur penelitian	18
III.2.1 Penambatan molekuler	18
Penyiapan struktur protein PfATP6	18
Penyiapan struktur ligan bruseantin	18
Penambatanmolekuler PfATP6-bruseantin	18
III.3.2 Simulasi dinamika molekuler	19
Persiapan simulasi dinamika molekuler	19
Simulasi dinamika molekuler ligan bruseantin dalam air	19

Simulasi dinamika molekuler kompleks PfATP6-bruseantin	19
BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN	21
IV.1 Penambatan molekuler	21
IV.2 Simulasi Dinamika Molekuler	23
IV.2.1 Sistem solvasi ligan bruseantin	23
Solvasi ligan bruseantin	24
Minimisasi energi	24
Ekuilibrasi sistem solvasi ligan bruseantin	26
Analisis RDF solvasi ligan bruseantin	28
Analisis jumlah ikatan hidrogen solvasi ligan bruseantin	31
Analisis energi bebas solvasi ligan bruseantin	32
IV.2.2 Dinamika molekuler kompleks PfATP6-bruseantin	33
Solvasi kompleks PfATP6-bruseantin	33
Minimisasi energi kompleks PfATP6-bruseantin	34
Ekuilibrasi sistem kompleks PfATP6-bruseantin	35
Analisis jumlah ikatan hidrogen kompleks PfATP6- bruseantin	36
Analisis pengaruh pelarut	38
Analisis energi bebas solvasi kompleks PfATP6- bruseantin	40
<i>Frame</i> simulasi kompleks PfATP6-bruseantin	41
Analisis RMSD	43
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN	45
V.1 Kesimpulan	45
V.2 Saran	45
DAFTAR PUSTAKA	46
LAMPIRAN	50