

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	<b>i</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	<b>ii</b>
<b>PERNYATAAN</b>	<b>iii</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>iv</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>v</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>viii</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	<b>ix</b>
<b>INTISARI</b>	<b>x</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xi</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	<b>5</b>
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Ketorolak	5
II.1.2 <i>Alpha-1-acid-glycoprotein</i> (AGP)	6
II.1.3 Kromatografi	7
II.1.4 Metode komputasi	8
II.1.5 Optimasi geometri molekul	11
II.1.6 Penambatan molekul	11
II.1.7 Optimasi kompleks inklusi	13
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	14
II.2.1 Perumusan hipotesis I	14
II.2.2 Perumusan hipotesis II	15
II.2.2 Perumusan hipotesis III	15
II.2.3 Rancangan penelitian	16
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	<b>17</b>
III.1 Alat Penelitian	17
III.2 Bahan Penelitian	17
III.3 Prosedur Penelitian	18
III.3.1 Optimasi geometri molekul R-/S-ketorolak	18
III.3.2 Penambatan molekul ligan alami pada protein AGP (penambatan ulang)	18
III.3.3 Penambatan spesifik ligan usulan R-/S-ketorolak pada protein AGP	19
III.3.4 <i>Blind docking</i> ligan usulan R-/S-ketorolak pada protein AGP	20
III.3.5 Optimasi kompleks inklusi	20
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>21</b>
IV.1 Pemilihan Metode Komputasi yang Paling Sesuai	21
IV.2 Optimasi Geometri Molekul R-/S-Ketorolak	25
IV.3 Penambatan Molekul Ligan Alami pada Protein AGP (Penambatan Ulang)	26



IV.4 Penambatan Spesifik Ligan Usulan R-/S-Ketorolak pada Protein AGP	28
IV.5 <i>Blind docking</i> Ligan Usulan R-/S-Ketorolak pada Protein AGP	33
IV.6 Interaksi Kompleks Inklusi	35
IV.7 Optimasi Kompleks Inklusi	36
IV.8 Perbandingan Hasil Metode Komputasi dan Hasil Eksperimen	39
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>41</b>
V.1 Kesimpulan	41
V.2 Saran	42
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>43</b>
<b>LAMPIRAN</b>	<b>48</b>