

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMBUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
DAFTAR SINGKATAN, ISTILAH, DAN LAMBANG	xi
INTISARI	xiii
ABSTRACT	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian.....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Senyawa kiral.....	5
II.1.2 Ibuprofen.....	6
II.1.3 Alpha-1-acid glycoprotein (AGP)	7
II.1.4 Pemisahan senyawa kiral	8
II.1.5 Kromatografi.....	10
II.1.6 Optimasi geometri.....	10
II.1.7 Pendekatan metode komputasi.....	10
II.1.8 Penambatan Molekul	12
II.1.9 Kompleks inklusi	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 Perumusan hipotesis III	16
II.2.4 Rancangan penelitian	16
BAB III METODE PENELITIAN	18
III.1 Alat dan Bahan Penelitian	18

III.1.1 Bahan penelitian	18
III.1.2 Alat penelitian	18
III.2 Prosedur Penelitian	18
III.2.1 Pemilihan metode komputasi dan optimasi geometri.....	18
III.2.2 Redocking dan penambatan spesifik molekul ibuprofen pada AGP	19
III.2.3 <i>Blind docking</i> senyawa ibuprofen pada AGP	20
III.2.4 Optimasi kompleks inklusi	20
III.2.5 Penentuan faktor pemisahan (α)	20
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	22
IV.1 Pemilihan Metode Komputasi yang Paling Sesuai	22
IV.2 Optimasi Geometri	24
IV.3 Penambatan Molekul Ligan Alami pada Protein AGP (<i>Redocking</i>)	25
IV.4 Penambatan Spesifik Kiral Ibuprofen dan AGP.....	27
IV.5 <i>Blind Docking</i> Kiral Ibuprofen dan AGP	30
IV.6 Optimasi Kompleks Inklusi.....	32
IV.7 Penentuan Nilai Faktor Pemisahan (α).....	34
IV.8 Perbandingan Hasil Komputasi dengan Hasil Eksperimen.....	35
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	38
V.1 Kesimpulan	38
V.2 Saran	39
DAFTAR PUSTAKA	40
LAMPIRAN.....	44