

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	i
HALAMAN PERNYATAAN	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI	iv
DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI	vi
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR LAMPIRAN	viii
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG.....	ix
ABSTRAK	x
ABSTRACT	xi
BAB I. PENDAHULUAN	1
1.1. Latar belakang.....	1
1.2. Rumusan masalah	2
1.3. Tujuan penelitian	2
1.4. Hipotesis penelitian	2
1.5. Manfaat penelitian.....	2
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1. Malaria	3
2.2. Antimalaria.....	6
2.3. Pare (<i>Momordica charantia</i> L.)	7
2.4. Plasmodium falciparum M1 alanyl aminopeptidase (PfA-M1)	8
2.5. Computer-Aided Drug Design (CADD)	9
2.6. Optimasi geometri	10
2.7. Parameter Sifat Fisiko Kimia.....	10
2.8. Density Functional Theory (DFT)	10
2.9. Penambatan molekul	10
2.10. Validasi Molecular <i>Docking</i>	11
2.11. AutoDock.....	11
2.12. Molecular Dynamica (MD)	12
BAB III. METODOLOGI PENELITIAN	16
3.1. Waktu dan tempat penelitian	16
3.2. Subjek penelitian.....	16
3.3. Metode pengumpulan data.....	16

3.4.	Analisis data	17
3.5.	Prosedur penelitian	17
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN		29
5.1.	Kesimpulan.....	29
5.2.	Saran	29
DAFTAR PUSTAKA		30
LAMPIRAN.....		34

DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI

Gambar 1 Siklus hidup Plasmodium.....	5
Gambar 2 Pare (<i>Momordica charantia</i> L.).....	8
Gambar 3 a) Makromolekul, b) Ligan alami.....	20
Gambar 4 Visualisasi tumpang tindih ligan alami PfA-M1 dengan hasil penambatan ulang (kuning) dan kristalografi sinar-X (hijau)	21
Gambar 5 RMSD Ligan Alami	23
Gambar 6 RMSD LU153.....	24
Gambar 7 RMSD LU129	25
Gambar 8 RMSD LU152	25
Gambar 9 Grafik nilai RMSF.....	26

DAFTAR TABEL

Tabel 1 Masa inkubasi Plasmodium.....	6
Tabel 2 Parameter validasi penambatan molekul PfA-M1.....	21
Tabel 3 Penambatan molekul protein PfA-M1.....	22
Tabel 4 Okupansi ikatan hidrogen	27
Tabel 5 Komponen energi MMGBSA	28

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Reseptor.....	34
Lampiran 2 Senyawa Pare (<i>Momordica charantia</i> L.).....	34
Lampiran 3 Pemodelan struktur ligan	75
Lampiran 4 Ikatan hidrogen bond	85
Lampiran 5 Optimasi geometri	87
Lampiran 6 Penambatan molekul.....	88
Lampiran 7 Hasil turnitin.....	90
Lampiran 8 Lembar bimbingan.....	91
Lampiran 9 Dokumentasi penelitian	92
Lampiran 10 CV	93

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN	NAMA
ADT	<i>Auto Dock Tools</i>
AMBER	<i>Assisted Model Building with Energy Refinement</i>
MD	<i>Molecular Dynamic</i>
WHO	<i>World Health Organization</i>
SBDD	<i>Subject Based Drug Design</i>
CADD	<i>Computer Aided Drug Design</i>
RMSD	<i>Root Mean Square Deviation</i>
RMSF	<i>Root Mean Square Fluctuation</i>
MMGBSA	<i>Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area</i>
RCSB	<i>Research Collaboratory for Structural Biology</i>
LU	<i>Ligan Uji</i>