

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
DAFTAR ARTI LAMBANG DAN SINGKATAN	xii
INTISARI	xiii
ABSTRACT	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Virus <i>novel corona</i>	5
II.1.2 Mekanisme molekul SARS-CoV-2 Mpro	6
II.1.3 Kurkumin dan analog kurkumin	7
II.1.4 Penambatan molekul	10
II.1.5 Simulasi dinamika molekul	12
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	15
II.2.1 Perumusan hipotesis I	15
II.2.2 Perumusan hipotesis II	16
II.2.3 Rancangan penelitian	17
BAB III METODE PENELITIAN	18
III.1 Alat Penelitian	18
III.2 Bahan Penelitian	18
III.3 Prosedur Penelitian	20
III.3.1 Pemilihan metode optimasi geometri	20
III.3.2 Penambatan molekul terhadap SARS-CoV-2 Mpro	21
III.3.3 Simulasi dinamika molekul	22
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	24
IV.1 Pemilihan Metode Optimasi Geometri	24
IV.2 Analisis Interaksi dengan Penambatan Molekul	26
IV.2.1 Tahap <i>redocking</i>	26
IV.2.2 Penambatan molekul kurkumin	29
IV.2.3 Penambatan molekul analog kurkumin A	30
IV.2.4 Penambatan molekul analog kurkumin B	32
IV.2.5 Penambatan molekul analog kurkumin C	33
IV.2.6 Penambatan molekul analog kurkumin D	35

IV.2.7 Penambatan molekul analog kurkumin E	36
IV.2.8 Penambatan molekul analog kurkumin F	38
IV.2.9 Penambatan molekul klorokuin	39
IV.2.10 Penambatan molekul hidrosiklorokuin	41
IV.2.11 Perbandingan hasil penambatan molekul	42
IV.3 Analisis Stabilitas dengan Simulasi Dinamika Molekul	46
IV.3.1 Dinamika dan kestabilan kompleks analog kurkumin E selama simulasi	49
IV.4 Analisis Retrosintesis dan Sintesis Senyawa Usulan	53
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	56
V.1 Kesimpulan	56
V.2 Saran	56
DAFTAR PUSTAKA	57
LAMPIRAN	65