

DAFTAR ISI

JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
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 Virus SARS-CoV-2	5
II.1.2 <i>Drug discovery</i>	6
II.1.3 <i>Density functional theory</i>	8
II.1.4 Simulasi Dinamika Molekul	10
II.1.5 Vitexin	12
II.1 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	13
II.1.1 Perumusan hipotesis 1	13
II.1.1 Perumusan hipotesis 2	14
II.1.1 Perumusan hipotesis 3	14
II.2.4 Rancangan penelitian	15
BAB III METODE PENELITIAN	17
III.1 Alat	17
III.2 Bahan	17
III.3 Prosedur Kerja	17
III.3.1 Preparasi molekul ligan	17
III.3.2 Desain senyawa baru	18
III.3.3 Penambatan molekul	18
III.3.4 Simulasi dinamika molekul	18
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	20
IV.1 Pemilihan Metode Optimasi Geometri	20
IV.2 Desain Senyawa Baru Turunan Vitexin	22
IV.3 Penambatan Molekul	26
IV.3.1 Proses <i>redocking</i>	26
IV.3.2 Proses <i>docking</i> senyawa Vitexin	30

IV.3.3 Proses <i>docking</i> senyawa M-3 [R-CH(CH ₃) ₂]	33
IV.3.5 Proses <i>docking</i> senyawa M-5 [R-COOH]	37
IV.3.6 Proses <i>docking</i> senyawa M-8 [R-OCH(CH ₃) ₂]	39
IV.3.7 Proses <i>docking</i> senyawa M-9 [R-OH]	42
IV.3.8 Perbandingan hasil <i>docking</i> senyawa turunan Vitexin	43
IV.4 Simulasi Dinamika Molekul	47
IV.5 Analisis Retrosintesis dan Sintesis Senyawa Usulan	56
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	60
V.1 Kesimpulan	60
V.2 Saran	60
DAFTAR PUSTAKA	61
DAFTAR LAMPIRAN	69