

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PERSETUJUAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
DAFTAR PUBLIKASI DAN SEMINAR	xi
DAFTAR ISTILAH, SINGKATAN, DAN LAMBANG	xii
INTISARI	xiii
ABSTRACT	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Perumusan Masalah	9
I.3 Keaslian dan Kebaruan Penelitian	9
I.4 Tujuan Penelitian	12
I.5 Manfaat penelitian	12
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	14
II.1 Tinjauan Pustaka	14
II.1.1 Tanaman herbal sebagai sumber bahan aktif alami	14
II.1.2 Senyawa kuersetin dan turunannya	17
II.1.3 <i>Severe Acute Respiratory Syndrome Corona Virus 2</i> (SARS-CoV-2)	20
II.1.4 Target pengobatan SARS-CoV-2	27
II.1.5 Pendekatan in silico dalam penemuan obat	38
II.1.6 Penambatan molekul (<i>molecular docking</i>)	43
II.1.7 Simulasi dinamika molekuler	47
II.1.8 Prediksi sifat fisikokimia dan profil farmakokinetik	53
II.2 Perumusan Hipotesis	55
II.2.1 Perumusan hipotesis I	55
II.2.2 Perumusan hipotesis II	56
II.2.3 Perumusan hipotesis III	57
II.2.4 Perumusan hipotesis IV	58
II.2.5 Perumusan hipotesis V	59
II.2.6 Rancangan penelitian	59
BAB III METODE PENELITIAN	62
III.1 Bahan dan Alat	62
III.1.1 Bahan	62
III.1.2 Alat penelitian	62
III.2 Prosedur Penelitian	63
III.2.1 Pengunduhan ligan dan protein	63

III.2.2 Preparasi protein dan ligan alami	63
III.2.3 Validasi metode penambatan molekul	64
III.2.4 Preparasi senyawa pembanding dan senyawa rancangan	64
III.2.5 Penambatan ligan dan protein	65
III.2.6 Pembuatan file PDB teoritis	66
III.2.7 Visualisasi interaksi	66
III.2.8 Analisis hasil penambatan molekul	66
III.2.9 Simulasi dinamika molekuler	67
III.2.10 Prediksi dan analisis sifat fisikokimia dan profil farmakokinetik	67
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	68
IV.1 SARS-CoV-2 Mpro Sebagai Target Utama Penghambatan	69
IV.1.1 Penambatan molekul menggunakan fungsi penilaian medan gaya	69
IV.1.2 Penambatan molekul SARS-CoV-2 Mpro menggunakan fungsi penilaian empiris	75
IV.1.3 Simulasi dinamika molekuler SARS-CoV-2 Mpro	79
IV.2 SARS-CoV-2 PLpro Sebagai Target Utama Penghambatan	84
IV.2.1 Penambatan molekul SARS-CoV-2 PLpro menggunakan fungsi penilaian medan gaya	84
IV.2.2 Simulasi dinamika molekuler SARS-CoV-2 PLpro	91
IV.3 SARS-CoV-2 RdRp Sebagai Target Utama Penghambatan	96
IV.3.1 Penambatan molekul SARS-CoV-2 RdRp menggunakan fungsi penilaian medan gaya	96
IV.3.2 Simulasi dinamika molekuler SARS-CoV-2 RdRp	103
IV.4 Prediksi dan Analisis Sifat Fisikokimia dari Senyawa Rancangan Terbaik	108
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	115
V.1 Kesimpulan	115
V.2 Saran	116
DAFTAR PUSTAKA	117
LAMPIRAN	136