

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	i
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	ii
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b>	iii
<b>PRAKATA</b>	v
<b>DAFTAR ISI</b>	vi
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	viii
<b>DAFTAR ARTI LAMBANG DAN SINGKATAN</b>	x
<b>INTISARI</b>	xi
<b>ABSTRACT</b>	xii
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 SARS-CoV-2	5
II.1.2 <i>Drug discovery</i>	6
II.1.3 Teori fungsi kerapatan	8
II.1.4 Simulasi dinamika molekuler	10
II.1.5 Myricitrin	11
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	12
II.2.2 Perumusan hipotesis 1	12
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	13
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	13
II.2.4 Rancangan penelitian	14
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	16
III.1 Peralatan	16
III.2 Bahan	16
III.3 Prosedur Kerja	16

III.3.1 Preparasi molekul ligan	16
III.3.2 Penambatan molekul	16
III.3.3 Simulasi dinamika molekuler	17
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	18
IV.1 Pemilihan Ligan dan Optimasi Geometri	18
IV.2 Penambatan Molekul	21
IV.2.1 Penambatan molekul ligan standar	23
IV.2.2 Penambatan molekul myricitrin	24
IV.2.3 Penambatan molekul ligan modifikasi –COOH	25
IV.2.4 Penambatan molekul ligan modifikasi –C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	26
IV.2.5 Penambatan molekul ligan modifikasi –H	28
IV.2.5 Penambatan molekul ligan modifikasi –OCH <sub>3</sub>	29
IV.2.6 Penambatan molekul ligan modifikasi –OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	29
IV.2.7 Penambatan molekul ligan modifikasi –PhOH	30
IV.2.8 Perbandingan hasil penambatan molekul	31
IV.3 Simulasi Dinamika Molekuler	34
IV.4 Analisis Retrosintesis	38
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	41
V.1 Kesimpulan	41
V.2. Saran	41
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	42
<b>LAMPIRAN</b>	46