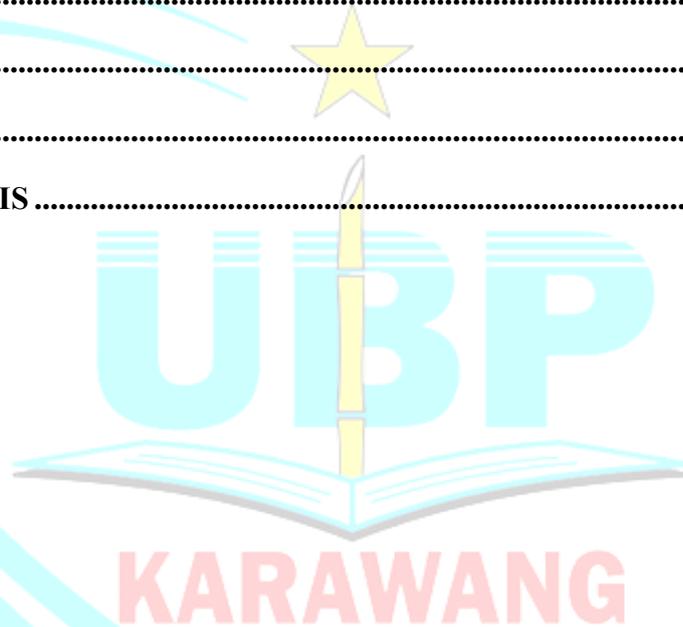


DAFTAR ISI

LEMBAR PERSETUJUAN	i
LEMBAR PENGESAHAN	ii
LEMBAR PERNYATAAN	iii
KATA PENGANTAR	iv
ABSTRAK	vi
ABSTRACT	vii
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR SINGKATAN	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumus Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	4
1.4 Manfaat Penilitan	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Tanaman Krokot	5
2.2 Taksonomi tanaman krokot	7
2.3 SARS-CoV-2	7
2.4 <i>Main Protease</i>	8
2.5 Remdesivir	8
2.6 <i>Chem Draw Ultra 12.0</i>	9
2.7 <i>Protein Data Bank</i>	9
2.8 <i>Molecular Docking</i>	10
2.9 Studi Bioinformatika	11

2.10 Hasil Penelitian Yang Relevan.....	11
BAB III METODE PENELITIAN	16
3.1 Jenis dan Rancangan Penelitian.....	16
3.2 Sampel	16
3.3 Alat Penelitian	16
3.4 Bahan Penelitian	16
3.5 Tempat Penelitian.....	19
3.6 Waktu Penelitian	19
3.7 Prosedur Penelitian.....	19
3.7.1 Preparasi Ligan.....	19
3.7.2 Preparasi Reseptor	20
3.7.3 Identifikasi reseptor Target	20
3.7.4 Validasi <i>Docking</i>	20
3.7.5 <i>Virtual Screening</i> dan <i>Docking</i> Ligan Terhadap Reseptor Target.....	21
3.7.6 Simulasi <i>Molecular Docking</i>	21
3.7.7 Prediksi profil farmakokinetik dan Toksisitas.....	21
3.7.8 Diagram penelitian	22
BAB IV	23
HASIL DAN PEMBAHASAN	23
4.1 <i>Molecular Docking</i>	23
4.1.1 Analisis dan Identifikasi Reseptor	23
4.1.2 Preparasi Reseptor	25
4.1.3 Preparasi Ligan.....	26
4.1.4 Validasi Metode <i>Docking</i>	26
4.1.5 <i>Virtual Screening</i>	28
4.1.6 Visualisasi Hasil <i>Docking</i>	29
4.2 <i>Molecular Dynamic</i>	33
4.3 <i>Screening Ligand Based Drug Likeness (Drug Scan)</i>	37
4.4 Prediksi Farmakokinetik dan Toksisitas	39
BAB V.....	45
KESIMPULAN DAN SARAN	45
5.1 Kesimpulan	45

5.2 Saran	45
DAFTAR PUSTAKA.....	46
LAMPIRAN I	53
LAMPIRAN II.....	56
LAMPIRAN III	57
LAMPIRAN IV	58
LAMPIRAN V	59
LAMPIRAN VI	62
LAMPIRAN VII.....	65
RIWAYAT PENULIS	68



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Tanaman Krokot	6
Gambar 2. 2 <i>Protein Data Bank</i> (PDB)	10
Gambar 3. 1 Turunan Flavonoid dari Tanaman Krokot	19
Gambar 4. 2 Struktur Reseptor <i>Main Protease</i> (6XBG).....	23
Gambar 4. 3 Plot Ramachandran 6XBG	24
Gambar 4. 4 Hasil ERRAT Reseptor MPro	25
Gambar 4. 5 Struktur Ligan alami 6XBG	27
Gambar 4. 6 Visualisasi 3D dan 2D isorhamnetin, ligan alami	33
Gambar 4. 7 Nilai RMSD Hasil MD	34
Gambar 4. 8 Nilai RMSF hasil MD	35
Gambar 4. 9 Kontak ligan- protein hasil <i>Molecular Dynamic</i> ligan terbaik.....	37

DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1 Penelitian Relevan.....	11
Tabel 4. 1 Data profil protein	23
Tabel 4. 2 Pengaturan <i>Grid Box</i>	27
Tabel 4. 3 Score Virtual Screening.....	29
Tabel 4. 4 Ikatan Hidrogen dan Hidrofobik	30
Tabel 4. 5 Hasil Drug Scan	37
Tabel 4. 6 Hasil Prediksi Profil Absorpsi dan Distribusi	40
Tabel 4. 7 Prediksi Profil Metabolisme.....	41
Tabel 4. 8 Prediksi Profil Ekskresi.....	42
Tabel 4. 9 Hasil Prediksi Toksisitas.....	43



DAFTAR SINGKATAN

%BBB	: <i>Persentase Blood Brain Barrier</i>
%HIA	: <i>Persentase Human Intestinal Absorbtion</i>
ADMET	: <i>Absorpsi Distribusi Metabolisme Ekskresi Toksisitas</i>
Caco-2	: <i>Human Epithelial Colorectal Adenocarcinoma Cells</i>
Ki	: <i>Konstanta Inhibisi</i>
LGA	: <i>Lamarckian Genetic Algorithm</i>
MD	: <i>Molecular Dynamics</i>
Mpro	: <i>Main Protease</i>
OCT2	: <i>Organic Cation Transporter 2</i>
PDB	: <i>Protein Data Bank</i>
RMSD	: <i>Root Mean Standar Deviation</i>
RMSF	: <i>Root Mean Standar Fluctuation</i>
SARS-CoV-2	: <i>Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus-2</i>
SAVES	: <i>Structure Analysis and Verification Server</i>
VDss	: <i>Volume Distribution</i>
FDA	: <i>Food and Drug Administration</i>

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. 1 Struktur Ligan alami dan Pembanding	53
Lampiran 1. 2 Struktur Senyawa Uji.....	53
Lampiran 2. 1 Hasil Validasi <i>Docking</i> 6XBG	56
Lampiran 3. 1 Hasil Drug Scan Isorhamnetin.....	57
Lampiran 4. 1 Hasil pkCSM senyawa Isorhamnetin.....	58
Lampiran 5. 1 Interaksi Hasil Simulasi <i>Molecular Dynamic</i> (MD).....	59
Lampiran 5. 2 Data Ligan Alami Hasil MD.....	59
Lampiran 5. 3 RMSF Ligan Hasil MD.....	60
Lampiran 5. 4 Histogram Interaksi Protein-Ligan	60
Lampiran 5. 5 Timeline Interaksi Ligan-Reseptor	60
Lampiran 5. 6 Torsion Ligan Hasil MD	61
Lampiran 6. 1 Interaksi Ligan-Reseptor Hasil MD.....	62
Lampiran 6. 2 Data Ligan Terbaik Hasil MD.....	62
Lampiran 6. 3 RMSF Ligan Hasil MD.....	62
Lampiran 6. 4 Histogram Interaksi Protein-Ligan	63
Lampiran 6. 5 Timeline Interaksi Ligan-Reseptor	63
Lampiran 6. 6 Torsion Ligan Hasil MD	63
Lampiran 7. 1 Interaksi Pembanding Hasil Simulasi <i>Molecular Dynamic</i> (MD).....	65
Lampiran 7. 2 Data Ligan Hasil MD.....	65
Lampiran 7. 3 RMSF Ligan Hasil MD.....	66
Lampiran 7. 4 Histogram Interaksi Protein-Ligan	66
Lampiran 7. 5 Timeline Interaksi Ligan-Reseptor	66
Lampiran 7. 6 Torsion Ligan Hasil MD	67