

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN PENGESAHAN	i
KATA PENGANTAR	v
RINGKASAN	vii
ABSTRACT.....	ix
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR TABEL.....	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiv
DAFTAR LAMPIRAN.....	xv
BAB I. PENDAHULUAN	
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Rumusan Masalah	4
1.3. Tujuan	4
1.3.1. Tujuan Umum	4
1.3.2. Tujuan Khusus.....	4
1.4. Manfaat	4
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	
2.1. Tinjauan Tentang COVID-19	5
2.1.1. Epidemiologi	5
2.1.2. Etiologi	5
2.1.3. Patogenesis	6
2.1.4. Morfologi SARS-CoV-2	7
2.1.5. Siklus Hidup SARS-CoV-2.....	8
2.1.6. Transmisi SARS-CoV-2.....	9
2.1.7. Gejala Terinfeksi	10
2.1.8. Faktor Resiko Infeksi COVID-19	10
2.1.9. Manajemen Klinis dan Alternatif Obat	10
2.2. Tinjauan Tentang Tanaman dan Senyawa Anti- <i>Coronavirus</i>	12
2.3. Tinjauan Tentang Arborinin.....	20
2.4. Tinjauan Tentang Chalepin	21
2.5. Tinjauan Tentang Filantin dan Hipofilantin.....	23
2.5.1. Filantin	24

2.5.2. Hipofilantin	25
2.6. Tinjauan Tentang Kurkumin	26
2.7. Tinjauan Tentang Kuersetin dan Rutin	28
2.7.1. Kuersetin	28
2.7.2. Rutin	29
2.8. Tinjauan Tentang Studi <i>In Silico</i>	32
2.8.1. Definisi dan Tujuan	32
2.8.2. Persyaratan <i>Docking</i>	33
2.8.3. Kategori Metode <i>Docking</i>	33
2.8.4. Interaksi Reseptor-Obat	34
2.8.5. Tipe Ikatan Kimia dalam Interaksi Reseptor-Obat	34
2.8.6. Hukum Lima Lipinski	40
2.8.7. Aplikasi <i>Docking</i>	41
2.9. Tinjauan Tentang Reseptor	42
BAB III. KERANGKA KONSEPTUAL	
3.1. Uraian Kerangka Konseptual	43
3.2. Hipotesis	43
3.3. Skema Kerangka Konseptual	44
BAB IV. METODE PENELITIAN	
4.1. Bahan dan Alat	45
4.1.1. Bahan	45
4.1.2. Alat	45
4.2. Metodologi Penelitian	45
4.2.1. Preparasi Struktur Protein	45
4.2.2. Preparasi Ligan	45
4.2.3. Evaluasi <i>Drug-likeness</i> menggunakan <i>DruLiTo</i>	46
4.2.4. <i>Docking</i> dan Analisis Asam Amino	47
4.2.5. Pengaturan <i>Docking</i>	48
4.3. Analisis Data	48
4.4. Skema Kerja	49
4.4.1. Preparasi Ligan	49
4.4.2. Evaluasi <i>Drug-likeness</i> menggunakan <i>DruLiTo</i>	50
4.4.3. <i>Docking</i> menggunakan <i>Molegro Virtual Docker</i>	51
BAB V. HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	52

BAB VI. PENUTUP

6.1. Kesimpulan	68
6.2. Saran.....	68
DAFTAR PUSTAKA	69
LAMPIRAN.....	83

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
II.1 Tanaman dan Senyawa yang Berpotensi sebagai Anti- <i>Coronavirus</i> pada Uji <i>In Silico</i>	12
II.2 Tanaman dan Senyawa yang Berpotensi sebagai Anti- <i>Coronavirus</i> pada Uji Pre-klinik	15
II.3 Tanaman dan Senyawa yang Berpotensi sebagai Anti- <i>Coronavirus</i> pada Uji Klinik	18
II.4 Klasifikasi Kekuatan Ikatan Hidrogen	36
II.5 Kriteria Hukum Lima Lipinski	40
IV.1 Pengaturan Program <i>Molegro Virtual Docker</i> untuk Reseptor 6LU7	48
IV.2 Pengaturan Program <i>Molegro Virtual Docker</i> untuk Reseptor 5R7Y	48
V.1 Evaluasi <i>Drug-likeness</i> terhadap Senyawa Uji	55
V.2 Nilai <i>Rerank Score</i> Hasil Simulasi <i>Docking</i> terhadap Reseptor 6LU7	56
V.3 Nilai <i>Rerank Score</i> Hasil Simulasi <i>Docking</i> terhadap Reseptor 5R7Y	56
V.4 Residu Asam Amino yang Terlibat dalam Interaksi pada Reseptor 6LU7	58
V.5 Residu Asam Amino yang Terlibat dalam Interaksi pada Reseptor 5R7Y	58

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1. Struktur dan genom SARS-CoV-2	7
2.2. Siklus hidup SARS-CoV-2	9
2.3. Struktur kimia senyawa arborinin (C ₁₆ H ₁₅ NO ₄)	20
2.4. Struktur kimia senyawa (C ₁₉ H ₂₂ O ₄)	21
2.5. Struktur kimia senyawa filantin (C ₂₄ H ₃₄ O ₆)	24
2.6. Struktur kimia senyawa hipofilantin (C ₂₄ H ₃₀ O ₇)	25
2.8. Struktur senyawa kimia kurkumin (C ₂₁ H ₂₀ O ₆)	26
2.7. Struktur kimia senyawa kuersetin (C ₁₅ H ₁₀ O ₇)	28
2.9. Struktur kimia senyawa rutin (C ₂₇ H ₃ O ₁₆)	30
2.10. Pembentukan ikatan hidrogen dalam interaksi obat-reseptor	36
2.11. Interaksi pada ikatan Van der Waal's	37
2.12. Pembentukan ikatan hidrofobik	38
2.13. Interaksi melalui transfer muatan	40
3.1. Alur kerangka konseptual	44
4.1. Bagan prosedur preparasi ligan	49
4.2. Bagan prosedur <i>docking</i> menggunakan <i>Molegro Virtual Docker</i>	51
5.1. Struktur senyawa uji	54
5.4. Interaksi antara ligan dengan residu asam amino reseptor 6LU7	59
5.5. Interaksi antara ligan dengan residu asam amino reseptor 5R7Y	60
5.6. Hidrofobisitas ikatan ligan dengan reseptor 6LU7	64
5.7. Hidrofobisitas ligan dengan reseptor 5R7Y	65
5.8. Ikatan elektrostatis ligan dengan reseptor 6LU7	66
5.9. Ikatan elektrostatis ligan dengan reseptor 5R7Y	66

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
1. <i>ChemDraw Professional</i> versi 15.0	84
2. <i>Chem3D</i> versi 15.0	84
3. Hasil gambar 3D struktur senyawa uji	85
4. Nilai <i>Minimize Energy</i>	86
5. <i>DruLiTo</i>	86
6. <i>Molegro Virtual Docker (MVD)</i> versi 6.0	87