

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
LEMBAR PENGESAHAN	iii
KATA PENGANTAR.....	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
BAB I. PENDAHULUAN	13
1.1. Latar Belakang.....	13
1.2. Rumusan Masalah.....	15
1.3. Tujuan dan Manfaat Penelitian	15
1.4. Hipotesis Penelitian	15
1.5. Tempat dan Waktu Penelitian.....	15
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	16
2.1. COVID – 19 dan Komorbid.....	16
2.2. Stroke	17
2.3. Pembekuan Darah	18
2.4. Warfarin	21
2.5. Mekanisme Kerja Warfarin	23
2.6. Deskripsi Tumbuhan <i>Psidium Guajava L.</i>	24
2.6.1. Klasifikasi Tumbuhan	25
2.6.2. Kandungan Senyawa Kimia	26
2.6.3. Aktivitas Farmakologi	29
2.6.4. Interaksi Daun Jambu Biji dan Efek Antikoagulasi	29
2.7. Penambatan Molekul	30
2.7.1. AutoDock	30
2.7.2. <i>Grid Box</i>	31
2.7.3. <i>Search Algorithm</i>	31
2.7.4. Validasi Penambatan Molekul.....	32
2.7.5. Analisis Interaksi	32

2.8.	Simulasi Dinamika Molekuler	33
2.8.1.	Topologi	35
2.8.2.	Produksi	35
2.8.3.	RMSD	36
2.8.4.	RMSF	36
2.8.5.	Analisis Interaksi dan Energi.....	37
2.8.6.	MM/GBSA	38
BAB III.METODOLOGI PENELITIAN		39
BAB IV.PROSEDUR PENELITIAN		40
4.1.	Alat.....	40
4.1.1.	Perangkat Keras.....	40
4.1.2.	Perangkat Lunak	40
4.2.	Bahan	40
4.2.1.	Makromolekul	40
4.2.2.	Prosedur Penelitian	40
BAB V. HASIL DAN PEMBAHASAN		43
5.1.	Struktur Protein Dan Ligan Alami.....	43
5.2.	Ligan Uji.....	44
5.3.	Penentuan Lokasi Penambatan Molekul.....	44
5.4.	Penambatan Ligan Uji	46
5.4.1.	Energi Bebas Ikatan (ΔG) dan Konstanta Inhibisi.....	46
5.4.2.	Analisis Interaksi	48
5.5.	Simulasi Dinamika molekul.....	50
6.5.1.	Root Mean Square Deviation (RMSD)	51
6.5.2.	Root Mean Square Fluctuation (RMSF).....	53
6.5.3.	Komponen energi	55
6.5.3.1.	MMGBSA	55
6.5.3.2.	Energi Dekomposisi	57
6.5.3.3.	Analisis Ikatan Hidrogen	58
BAB VI.SIMPULAN DAN SARAN		60
6.1.	KESIMPULAN.....	60

6.2. SARAN.....	60
DAFTAR PUSTAKA.....	61
LAMPIRAN	68

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1. Algoritma Penyebab dan Penyembuhan Stroke	17
Gambar 2.2. Mekanisme Pembekuan Darah	19
Gambar 2.3. Struktur Warfarin.....	21
Gambar 2.4. Metabolisme CYP2C9 terhadap enansiomer S-Warfarin.....	22
Gambar 2.5. Siklus Vitamin K dan Intervensi Warfarin	23
Gambar 2.6 Enzim VKORC1 (6WV3) dan Ligan Alami SWF.	24
Gambar 2.7. Visualisasi Bagian Tanaman <i>Psidium Guajava</i> L.....	25
Gambar 2.8. Visualisasi Daun <i>Psidium guajava</i>	26
Gambar 2.9. Ilustrasi Analisis Konformasi Stabilitas dan Fleksibilitas	33
Gambar 2.10. Proses Dinamika Molekuler	34
Gambar 2.11. Tahapan Dinamika Molekuler	35
Gambar 2.12. Translokasi Substrat Pada Simulasi Dinamika Molekuler	37
Gambar 5.1. Hasil pemisahan Makromolekul Dengan Ligan Alami	43
Gambar 5.2. Overlay Ligan Alami	45
Gambar 5.3. Interaksi Antara Ligan Alami Dengan Target Protein.....	45
Gambar 5.4. Grafik Visualisasi Fluktuasi Ikatan Residu – Ligan	53
Gambar 5.5. Grafik Hasil Perhitungan MMGBSA	55
Gambar 5.6. Grafik Energi Dekomposisi	57

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1. Faktor Pembekuan Darah.....	20
Tabel 2.2. Senyawa Kuersetin Pada Daun Jambu Biji.....	27
Tabel 2.3. Senyawa Golongan Alkaloid, Flavonoid, dan Fenolik Jambu Biji.....	28
Tabel 5.1. Energi Bebas Ikatan (ΔG) Konstanta Inhibisi (KI).....	47
Tabel 5.2. Interaksi Residu – Ligan	48
Tabel 5.3. Overlaying Rmsd Ligan Dan Protein.....	52
Tabel 5.4. RMSF Ligan Alami dan Ligan Uji	54
Tabel 5.5. Hasil Perhitungan Total Energi Dengan MMGBSA	56
Tabel 5.6. Energi Dekomposisi Pada Residu Utama	57
Tabel 5.7. Ikatan Hidrogen.....	58

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Ligan Uji.....	68
Lampiran 2. Interaksi Ligan – Asam Amino	70
Lampiran 3. Hidrogen Bond Selama 100ns	84
Lampiran 4. Pengecekan Plagiarisme	84
Lampiran 5. Format Surat Pernyataan Bebas Plagiasi	86
Lampiran 6. Format Surat Persetujuan untuk dipublikasikan di media on line	87