

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
BAB I. PENDAHULUAN	1
1.1. Latar belakang	1
1.2. Rumusan masalah	2
1.3. Tujuan dan manfaat penelitian	2
1.4. Hipotesis penelitian	2
1.5. Tempat dan waktu Penelitian	2
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	2
2.1. Virus SARS-CoV-2	2
2.1.1 Proses replikasi Virus SARS-CoV-2	2
2.1.3 Angiotensin converting enzyme 2 (ACE2)	3
2.2. Navicula salinicola	4
2.3 Computer Aided Drug Design (CADD)	5
2.4 Penambatan Molekul	5
2.4.1 AutoDock	6
2.4.2 Grid box	6
2.4.3 Search Algorithm	6
2.4.4 Validasi Penambatan Molekul	7
2.4.5 Parameter Penambatan Molekul	7
2.6 Dinamika Molekul	7
2.6.1 Topologi	8
2.6.2 Produksi	8
2.6.3 RMSD (Root Mean Square Deviation)	9
2.6.4 RMSF (Root Mean Square Fluctuation)	9
2.6.5 MMGBSA	9

BAB III. METODOLOGI PENELITIAN	10
IV. ALAT DAN BAHAN	11
4.1. Alat.....	11
4.1.1 Perangkat keras	11
4.2.1 Makromolekul.....	11
4.2.2 Ligan Uji.....	11
BAB V. PROSEDUR PENELITIAN	12
5.1. Penyiapan Ligan Uji	12
5.2. Penyiapan Struktur Molekul Target.....	12
5.3. Validasi Penambatan Makromolekul dengan Ligan Alami	12
5.4. Penambatan ligan Uji.....	13
5.5. Simulasi dinamika molekul.....	13
BAB VI. HASIL DAN PEMBAHASAN	15
6.1 Struktur ligan dan protein	15
6.2 Lokasi penambatan ligan alami	15
6.3 Validasi lokasi penambatan ligan alami	16
6.3 Energi ikatan dan konstansta inhibisi	18
6.4 Dinamika Molekul	20
6.4.1 RMSD	20
6.4.2 RMSF	22
6.4.3 Analisis MM/GBSA Ligan-Reseptor.....	22
BAB VII. SIMPULAN DAN SARAN	24
DAFTAR PUSTAKA	25
LAMPIRAN	30
Lampiran 1 15 senyawa uji asam lemak tak jenuh	30
Lampiran 2 Prosedur penambatan molekul	33
Lampiran 3 Prosedur dan script MD.....	36
Lampiran 4 hasil turnitin.....	40
Lampiran 5 Surat persetujuan untuk dipublikasikan di media on line.....	41
Lampiran 6 Surat pernyataan bebas plagiasi	42

DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI

Gambar 2.1 Proses masuknya Virus SARS-CoV-2 ke dalam sel target (Hartenian dkk., 2020).	2
Gambar 2.2 <i>Navicula salinicola</i> (Kurnia, 2020).....	4
Gambar 6.1 (a) Struktur 3D rantai protein spike glycoprotein (b) struktur ligan kristalografi sinar-x (S. Zhang dkk., 2021).	15
Gambar 6.2 Visualisasi tumpang tindih ligan alami hasil penambatan ulang (biru) dan ligan alami (Kuning).....	17
Gambar 6.3 Visualisasi senyawa uji terbaik senyawa DHA dan EPA	20
Gambar 6.4 Grafik nilai RMSD Ligan Alami (a), Ligan Uji DHA (b), Ligan Uji EPA (c)	21
Gambar 6.5 Grafik nilai RMSF ligan alami, ligan uji DHA, ligan uji EPA	22

DAFTAR TABEL

Tabel 6.1 Parameter validasi penambatan molekul.....	17
Tabel 6.2 Visualisasi penambatan ulang interaksi ligan alami dan protein spike.....	18
Tabel 6.3 Hasil penambatan senyawa uji dengan protein spike.....	19
Tabel 6.4 Nilai energi ikatan.....	23

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 15 senyawa uji asam lemak tak jenuh	30
Lampiran 2 Prosedur penambatan molekul	33
Lampiran 3 Prosedur dan script MD	36
Lampiran 4 hasil turnitin	40
Lampiran 5 Surat persetujuan untuk dipublikasikan di media on line	41
Lampiran 6 Surat pernyataan bebas plagiasi	42

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN	NAMA
SARS	<i>Severe Acute Respiratory Syndrome-Coronavirus-2</i>
ACE2	<i>angiotensin-converting enzyme 2</i>
EPA	<i>eicosapentaenoic acid</i>
DHA	<i>docosahexaenoic acid</i>
TMPRSS2	<i>transmembrane protease serine 2</i>
RMSD	<i>Root mean square deviation</i>
RMSF	<i>Root mean square fluctuation</i>
MM/GBSA	<i>molecular mechanics generalized Born surface</i>
PDB	<i>Protein Data Bank</i>
AMBER	<i>Assisted Model Building with Energy Refinement</i>
KI	<i>konstanta inhibisi</i>