

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL .....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
KATA PENGANTAR .....	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR GAMBAR .....	viii
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR LAMPIRAN.....	xii
ABSTRAK .....	xiii
ABSTRACT .....	xiv
DAFTAR SINGKATAN .....	xv
GLOSARIUM.....	xvi
BAB I PENDAHULUAN .....	1
I.1 Latar Belakang.....	1
I.2 Tujuan Penelitian .....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	5
II.1 Mikroplastik.....	5
II.2 Protein.....	6
II.3 <i>Human Serum Albumin</i> (HSA) .....	8
II.4 Poliuretan (PU) .....	9
II.5 Kimia Komputasi .....	11
II.6 <i>Molecular Docking</i> .....	12
II.7 <i>Molecular Dynamic</i> (MD) .....	14
II.8 Interaksi Antarmolekul .....	16
II.8.1 Ikatan Hidrogen .....	16
II.8.2 Interaksi Hidrofobik.....	17
II.9 Energi Interaksi.....	18
II.10 Total Energi Potensial.....	19
II.11 <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD).....	20
II.12 Radius Girasi (Rg) .....	21

II.13 Energi Bebas Ikatan .....	22
II.14 Spektrofotometri UV-Vis.....	22
II.15 Fluoresensi .....	24
II.15.1 Mekanisme Fluoresensi <i>Quenching</i> .....	24
II.16 FTIR ( <i>Fourier Transform Infrared</i> ) Spektroskopi .....	25
BAB III METODE PENELITIAN.....	27
III.1 Waktu dan Tempat Penelitian .....	27
III.2 Alat dan Bahan .....	27
III.2.1 Alat.....	27
III.2.2 Bahan .....	27
III.3 Variabel Penelitian .....	28
III.3.1 Perhitungan <i>Molecular Docking</i> dan <i>Molecular Dynamic</i> Protein HSA dengan PU.....	28
III.3.2 Pengukuran Spektrofotometer UV-Vis.....	28
III.3.3 Pengukuran Spektrofotometer Fluoresensi .....	29
III.3.1 Pengukuran FTIR ( <i>Fourier Transform Infrared</i> ) .....	29
III.4 Cara Kerja.....	30
III.4.1 Persiapan Molekul Protein HSA dan Molekul PU .....	30
III.4.2 Optimasi Geometri Molekul Protein HSA dan Molekul PU .....	30
III.4.3 Perhitungan <i>Molecular Docking</i> .....	31
III.4.4 Perhitungan <i>Molecular Dynamic</i> (MD).....	32
III.4.5 Preparasi Larutan HSA dan Larutan PU .....	34
III.4.6 Pengukuran Spektrofotometer UV-Vis.....	34
III.4.7 Pengukuran Spektrofotometer Fluoresensi .....	35
III.4.8 Pengukuran FTIR ( <i>Fourier Transform Infrared</i> ) .....	35
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....	37
IV.1 Analisis Molekul Protein <i>Human Serum Albumin</i> (HSA) dan Molekul <i>Poliuretan</i> (PU).....	37
IV.2 Analisis Optimasi Geometri Molekul Protein HSA dan PU.....	38
IV.3 Analisis Data <i>Molecular Docking</i> HSA dengan PU .....	41
IV.4 Analisis Data MD Kompleks HSA...PU .....	45
IV.4.1 Analisis Total Energi Potensial.....	46

IV.4.2	Analisis <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD).....	48
IV.4.3	Analisis Radius Girasi (Rg) .....	49
IV.4.4	Analisis Energi Bebas Ikatan ( $\Delta G_{\text{bind}}$ ) .....	51
IV.4.5	Analisis Perubahan Struktur Konformasi Protein HSA.....	52
IV.5	Analisis Struktur Sekunder Kompleks <i>Helix</i> HSA...PU .....	55
IV.5.1	Analisis Kompleks Helix HSA...PU 2 Monomer .....	56
IV.5.2	Analisis Kompleks Helix HSA...PU 5 Monomer .....	65
IV.6	Analisis Data Spektrofotometer UV-Vis .....	75
IV.7	Analisis Data Spektrofotometer Fluoresensi.....	78
IV.7.1	Analisis Fluoresensi <i>Quenching</i> .....	79
IV.8	Analisis Turunan Kedua Spektrum <i>Infrared</i> (SDIR).....	84
BAB V PENUTUP.....		86
V.1	Kesimpulan .....	86
V.2	Saran .....	86
DAFTAR PUSTAKA .....		87
LAMPIRAN .....		92