

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN.....	iii
KATA PENGANTAR.....	iv
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
DAFTAR SINGKATAN.....	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah.....	5
C. Keaslian Penelitian.....	5
D. Kepentingan Penelitian	5
E. Tujuan Penelitian	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7
A. Telaah Pustaka	7
1. Parasetamol	7
2. <i>Carica papaya</i>	13
3. Enzim.....	16
4. <i>Homology Modelling</i>	26
5. <i>Molecular Dynamics</i>	31
6. <i>Covalent Docking</i>	33
7. Kromatografi Lapis Tipis – Densitometri	35
B. Landasan Teori.....	36
C. Kerangka Konsep Penelitian.....	40
D. Hipotesis	40

BAB III METODE PENELITIAN	41
A. Rancangan Penelitian.....	41
B. Tempat dan Waktu Penelitian.....	41
C. Bahan dan Subyek penelitian.....	41
D. Variabel Penelitian.....	42
E. Definisi Operasional Variabel.....	43
F. Instrumen Penelitian	43
G. Jalannya Penelitian.....	44
H. Analisis Data.....	48
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	49
A. Pemodelan Struktur 3D Protein Secara <i>Homology Modelling</i>	49
1. <i>Homology modelling</i> enzim GDSL esterase/lipase	49
2. Hasil pemodelan protein GDSL esterase/lipase	49
3. Evaluasi kualitas model protein GDSL esterase/lipase	53
B. <i>Molecular Dynamics</i>	57
C. <i>Covalent Docking</i> dan <i>Docking</i> PAF	60
D. Konfirmasi Eksperimental	64
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	68
A. KESIMPULAN	68
B. SARAN	68
DAFTAR PUSTAKA	69
LAMPIRAN.....	74

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. Struktur Parasetamol	7
Gambar 2. Mekanisme reaksi sintesis parasetamol dari para aminofenol (PAF) ..	8
Gambar 3. Mekanisme toksisitas NAPQI pada sel hati	12
Gambar 4. Tanaman Carica papaya	14
Gambar 5. Empat tingkatan struktur protein.....	17
Gambar 6. Bentuk struktur 3D enzim CaLB (Candida antarctica Lipase B).....	25
Gambar 7. Mekanisme katalisis oleh CaLB (Rantwijk dan Sheldon, 2004)	26
Gambar 8. Multiple Sequence Alignment FASTA Sequence dengan template ..	51
Gambar 9. Struktur 3D model final enzim GDSL esterase/lipase	52
Gambar 10. Superimposisi model final GDSL esterase/lipase dengan template...	53
Gambar 11. Ramachandran plot model enzim GDSL esterase/lipase	54
Gambar 12. Pemeriksaan kualitas folding model enzim GDSL esterase/lipase. ...	56
Gambar 13. Perbandingan bentuk pocket binding site pada pH yang berbeda.....	58
Gambar 14. Kurva RMSD model enzim GDSL esterase/lipase pH 5, 7 dan 9	59
Gambar 15. Hasil covalent docking etil asetat terhadap enzim GDSL.....	61
Gambar 16. Hasil docking PAF pada binding site enzim GDSL esterase/lipase ..	63
Gambar 17. Interaksi 2D hasil docking PAF pada binding site enzim GDSL.....	64
Gambar 18. Hasil pemisahan KLT	65

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Jumlah bahan untuk sintesis Parasetamol dari PAF	47
Tabel 2. RMSD Residu GDSL esterase/lipase catalytic triad dan oxyanion hole .	60
Tabel 3. Score covalent docking etil asetat pada binding site enzim GDSL	61
Tabel 4. Nilai scoring docking PAF ke binding site enzim GDSL.....	62
Tabel 5. Hasil pembacaan secara densitometri	66



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Output analisis sekuensial enzim GDSL esterase/lipase.....	75
Lampiran 2. Hasil output Server Phyre2.....	76
Lampiran 3. Tabel hasil output Server Phyre2	78
Lampiran 4. Website PDB	79
Lampiran 5. Kurva hasil pembacaan CAMAG TLC Scanner	82