

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PERNYATAAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
HALAMAN MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Kasus gigitan ular	5
II.1.2 Enzim sPLA ₂ 1A	5
II.1.3 Proses <i>envenomation</i> PLA ₂ 1A	6
II.1.4 Ion Ca ²⁺	6
II.1.5 Simulasi dinamika molekul	7
II.1.6 Potensial gromos	9
II.1.7 <i>Periodic boundary condition</i>	10
II.1.8 Analisis <i>radial distribution function</i>	11
II.1.9 Model molekul air	11
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	12
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	12
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	12
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	13
II.3 Rancangan Penelitian	13
BAB III METODE PENELITIAN	14
III.1 Alat dan Bahan	14
III.1.1 Perangkat keras	14
III.1.2 Perangkat lunak	14
III.1.3 Bahan	14
III.2 Prosedur Penelitian	14
III.2.1 Preparasi enzim	14
III.2.2 Pembentukan topologi	14
III.2.3 Kotak simulasi dan netralisasi sistem	15
III.2.4 Energi minimasi dan ekuilibrasi sistem	15

III.2.5	Simulasi dinamika molekul	15
III.2.6	Analisis data	15
BAB IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	16
IV.1	Simulasi Dinamika Molekul Kompleks Ca ²⁺ -PLA ₂ 1A	16
IV.2	Analisis Trayektori	19
IV.2.1	Analisis RDF ion Ca ²⁺ -O dari semua residu	19
IV.2.2	Analisis RMSD kompleks Ca ²⁺ -PLA ₂ 1A	21
IV.2.3	Analisis <i>gyration</i> kompleks Ca ²⁺ -PLA ₂ 1A	22
IV.2.4	Bilangan koordinasi Ca	25
IV.2.5	Analisis dinamika ikatan hidrogen	26
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	33
V.1	Kesimpulan	33
V.2	Saran	33
	DAFTAR PUSTAKA	34
	LAMPIRAN	40