

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	<b>i</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	<b>ii</b>
<b>PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI</b>	<b>iii</b>
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b>	<b>iv</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>v</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>vi</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>viii</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>ix</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	<b>x</b>
<b>DAFTAR ISTILAH, SINGKATAN DAN LAMBANG</b>	<b>xi</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xii</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xiii</b>
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	<b>4</b>
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Protein p53	4
II.1.2 Ion kalsium	5
II.1.3 Simulasi dinamika molekular	7
II.1.4 Ensemble	10
II.1.5 <i>Periodic Boundary Condition</i> (PBC)	10
II.1.6 <i>Minimum Image Convention</i> (MIC)	11
II.1.7 AMBER	12
II.1.8 Model molekul air	13
II.1.9 <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD)	14
II.1.10 <i>Root Mean Square Fluctuation</i> (RMSF)	14
II.1.11 <i>Radial Distribution Function</i> (RDF)	15
II.1.12 Ikatan hidrogen	15
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	16
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	16
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	17
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	17
II.3 Rancangan Penelitian	18
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	<b>19</b>
III.1 Bahan Penelitian	19
III.2 Alat Penelitian	19
III.3 Prosedur Penelitian	19

III.3.1 Tahap preparasi	19
III.3.2 Tahap simulasi dinamika molekular	20
III.3.3 Tahap analisis data	21
<b>BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN</b>	<b>22</b>
IV.1 Penambatan Ion Ca <sup>2+</sup> pada Protein p53	22
IV.2 Simulasi Kompleks Protein p53-ion Ca <sup>2+</sup> dalam Air	24
IV.3 Analisis Trayektori	27
IV.3.1 Analisis RMSD kompleks protein p53-ion Ca <sup>2+</sup>	27
IV.3.2 Analisis RMSF kompleks protein p53-ion Ca <sup>2+</sup>	28
IV.3.3 Analisis RDF kompleks protein p53-ion Ca <sup>2+</sup>	29
IV.4 Analisis Distribusi Bilangan Koordinasi	34
IV.5 Pengaruh Pelarut Air dalam Ikatan Hidrogen	35
IV.6 Analisis Energi Bebas Ikatan Kompleks Protein p53-ion Ca <sup>2+</sup>	38
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>40</b>
V.1 Kesimpulan	40
V.2 Saran	40
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>41</b>
<b>LAMPIRAN</b>	<b>45</b>