

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
HALAMAN MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Kanker dan tumor	4
II.1.2 Gen dan protein p53	4
II.1.3 Simulasi dinamika molekular	5
II.1.4 Periodic Boundary Condition (PBC)	8
II.1.4 Ion alium	9
II.1.5 Hidrasi ion	9
II.1.6 Analisis Radial Distribution Function (RDF)	10
II.1.7 Potensial AMBER	10
II.1.8 Ikatan hidrogen	11
II.1.9 Model molekul air	12
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	13
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	13
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	13
II.2.3 Rancangan penelitian	14
BAB III METODE PENELITIAN	15
III.1 Bahan	15
III.2 Alat	15
III.3 Prosedur Penelitian	15
III.3.1 Simulasi dinamika molekular kompleks ion-protein dalam air	16

III.3.2 Analisis trajektori	17
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	18
IV.1 Simulasi Dinamika Molekuler Kompleks K^+ - P53 Dalam Air	18
IV.2 Analisis Trajektori	22
IV.2.1 Analisis konformasi kompleks	22
IV.2.2 Analisis RDF	23
IV.2.2.1 Analisis RDF ion K^+ - O air	23
IV.2.2.2 Analisis RDF ion K^+ - O protein	27
IV.2.2.3 Analisis RDF ion K^+ - O semua residu	30
IV.2.2.4 Analisis RDF ion K^+ - N protein	31
IV.2.3 Analisis dinamika ikatan hidrogen	32
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	34
V.1 Kesimpulan	34
V.2 Saran	34
DAFTAR PUSTAKA	35
LAMPIRAN	38