

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI	v
DAFTAR TABEL.....	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN	xi
DAFTAR SIMBOL	xii
GLOSARIUM.....	xiii
ABSTRAK	xiv
ABSTRACT.....	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	4
II.1 Hemodialisis.....	4
II.2 Protein	5
II.3 <i>Human Serum Albumin</i> (HSA).....	6
II.4 Polietersulfon (PES).....	8
II.5 Polivinilpirolidon (PVP)	9
II.6 Kimia Komputasi	10
II.7 <i>Molecular Docking</i>	10
II.8 Dinamika Molekul	12
II.9 Interaksi Antarmolekul.....	13
II.9.1 Ikatan Hidrogen.....	14
II.9.2 Interaksi Hidrofobik	15
II.9.3 Interaksi van der Waals	16
II.9.4 Interaksi Ionik	17
II.10 Energi Interaksi	17
II.11 Total Energi Potensial	18
II.12 Root Mean Square Deviation (RMSD).....	20

II.13	Radius Girasi (R_g)	21
II.14	Energi Bebas Ikatan	22
BAB III METODE PENELITIAN.....		23
III.1	Waktu dan Tempat Penelitian.....	23
III.2	Alat dan Bahan.....	23
III.2.1	Alat.....	23
III.2.2	Bahan.....	23
III.3	Variabel Penelitian	24
III.3.1	Variabel Tetap.....	24
III.3.2	Variabel Berubah.....	24
III.3.3	Variabel Terukur.....	24
III.4	Cara Kerja	24
III.4.1	Dinamika Molekul Protein <i>Human Serum Albumin</i> (HSA).....	24
III.4.2	Optimasi Geometri Polimer Polietersulfon (PES)	25
III.4.3	Optimasi Geometri Polimer Polivinilpirolidon (PVP).....	26
III.4.4	<i>Molecular Docking</i> Protein HSA dengan Polimer PES	27
III.4.5	<i>Molecular Docking</i> Protein HSA dengan Polimer PVP.....	28
III.4.6	Dinamika Molekul Kompleks HSA...PES	29
III.4.7	Dinamika Molekul Kompleks HSA...PVP.....	30
BAB IV PEMBAHASAN.....		33
IV.1	Dinamika Molekul Protein <i>Human Serum Albumin</i> (HSA).....	33
IV.2	Dinamika Molekul Polimer Polietersulfon (PES).....	37
IV.3	Dinamika Molekul Polimer Polivinilpirolidon (PVP)	39
IV.4	<i>Molecular Docking</i> Protein HSA dengan Polimer PES	41
IV.5	<i>Molecular Docking</i> Protein HSA dengan Polimer PVP.....	44
IV.6	Dinamika Molekul Kompleks HSA...PES	46
IV.6.1	Total Energi Potensial Kompleks HSA...PES	46
IV.6.2	<i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD) Kompleks HSA...PES.....	47
IV.6.3	Radius Girasi (R_g) Kompleks HSA...PES	48
IV.6.4	Energi Bebas Ikatan (ΔG_{bind}) Kompleks HSA...PES	49
IV.6.5	Perubahan Interaksi Kompleks HSA...PES Selama Simulasi.....	50
IV.7	Dinamika Molekul Kompleks HSA...PVP.....	53

IV.7.1 Total Energi Potensial Kompleks HSA...PVP.....	54
IV.7.2 <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD) Kompleks HSA...PVP	55
IV.7.3 Radius Girasi (Rg) Kompleks HSA...PVP	56
IV.7.4 Energi Bebas Ikatan (ΔG_{bind}) Kompleks HSA...PVP	57
IV.7.5 Perubahan Interaksi Kompleks HSA...PVP Selama Simulasi	58
BAB V PENUTUP	62
V.1 Kesimpulan	62
V.2 Saran.....	62
DAFTAR PUSTAKA	63