

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI.....	iv
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	vii
DAFTAR LAMPIRAN.....	viii
ABSTRAK.....	ix
BAB I PENDAHULUAN.....	1
I.1. Latar Belakang.....	1
I.2. Tujuan Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	6
II.1. <i>Human Immunodeficiency Virus</i> (HIV).....	6
II.1.1 Enzim Integrase.....	10
II.1.2 LEDGINS.....	12
II.2. Tanaman Delima.....	16
II.1.1 Fitokimia.....	17
II.3. Dinamika Molekuler.....	20
II.3.1 Perangkat Lunak untuk Simulasi MD.....	22
II.3.2 Medan Gaya (<i>Force Field</i>) dalam Simulasi.....	23
II.3.3 Analisis Hasil MD.....	24
BAB III METODE PENELITIAN.....	27
III.1. Bahan.....	27
III.1.1. Enzim.....	27
III.1.2. Ligan.....	27
III.2. Alat.....	27
III.2.1. Perangkat Keras.....	27
III.2.2. Perangkat Lunak.....	27
III.3. Prosedur Kerja.....	28
III.3.1 Preparasi dan Validasi Struktur 3-dimensi Protein.....	28
III.3.2 Preparasi dan Validasi Struktur 3-dimensi Ligan.....	29
III.3.3 <i>Molecular Docking</i>	29
III.3.4 <i>Molecular Dynamic</i>	30

III.3.5 Analisis.....	31
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	33
IV.1 Preparasi dan Validasi Struktur Protein dan Ligan	34
IV.1.1 Preparasi dan Validasi Struktur 3-Dimensi Protein.....	34
IV.1.2 Preparasi dan Validasi Struktur 3-Dimensi Ligan	36
IV.2 Posisi, Orientasi, dan <i>Binding Affinity</i> Ligan Sampel Terbaik pada Kompleks HIV-1 Integrase dengan LEDGF/p75	38
IV.3 Simulasi <i>Molecular Dynamic</i>	40
IV.3.1 Minimasi Energi Kompleks Enzim HIV-1 Integrase-Ligan.....	40
IV.3.2 Ekuilibriasi Kompleks Enzim HIV-1 Integrase-Ligan	41
IV.4 Analisis Hasil Produksi Dinamika Molekuler selama 20 ns.....	43
IV.4.1 Jari-jari Girasi Enzim HIV-1 Integrase.....	43
IV.4.2 <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD)	44
IV.4.3 Energi Interaksi Ligan dengan Enzim HIV-1 Integrase	49
IV.4.4 Residu dan Gugus Penentu Reaksi.....	52
IV.4.5 Perubahan Konformasi Sisi Katalitik	55
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	59
V.1. Kesimpulan	59
V.2. Saran.....	60
DAFTAR PUSTAKA	61
LAMPIRAN	66