

## DAFTAR ISI

JUDUL .....	i
PENGESAHAN .....	ii
KATA PENGANTAR .....	iii
RINGKASAN .....	v
SUMMARY .....	vi
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR GAMBAR .....	x
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiii
BAB I PENDAHULUAN .....	1
1.2. Rumusan Masalah.....	5
1.3. Tujuan Penelitian .....	5
1.4. Manfaat Penelitian .....	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	7
2.1. <i>Hyptis pectinata</i> (L) Poit .....	7
2.2. 1-Amina-3-Siloxy-1,3-Butadiena.....	8
2.3. Histone Deacetylase (HDAC) .....	8
2.3.1. Klasifikasi Histone deacetylase .....	10
2.3.2. Inhibitor Histone Deacetylase (HDAC).....	11
2.4. Penentuan Struktur Hasil Sintesis .....	12
2.4.1. Spektrometer Resonansi Magnetik Inti.....	12
2.4.2. Thin Layer Chromatography-Mass Spectrometry (TLC-MS).....	13
2.4.3. Spektroskopi Infra Merah (FTIR).....	15
2.5. Uji Sitotoksitas <i>Pada Breast Cancer Stem Cell</i> .....	16
2.6. MTT Assay .....	17
2.7. <i>Flow Cytometry</i> dan Siklus Sel.....	18
2.8. Studi In Silico.....	19
2.9. Molecular Dynamic (MD).....	21
2.10. Metode Kimia Komputasi .....	21
2.10.1. Density Fuctional Theory (DFT) .....	21

2.10.2. Time-Dependent Density Fuctional Theory (TDDFT).....	22
2.10.3. Metode Ab Initio.....	23
2.10.4. Orbital Molekul.....	23
2.11. Analisa Hasil Komputasi.....	25
2.11.1. <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD).....	25
2.11.2. Energi Ikatan.....	25
2.11.3. Ikatan Hidrogen .....	26
2.11.4. Energi Bebas Gibbs ( $\Delta G$ ) .....	26
BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	28
3.1. Alat dan Bahan.....	28
3.1.1. Alat.....	28
3.2.2. Bahan .....	28
3.4. Variabel Penelitian .....	29
3.4.1. Variabel Bebas.....	29
3.4.2. Variabel Terikat .....	29
3.4.3. Variabel Terkendali .....	29
3.5. Prosedur Penelitian.....	29
3.5.1. Rancangan Penelitian.....	29
3.5.2. Sintesis Senyawa <i>N,N</i> -dimetilsiklohexylenamine-hiptolida ( <b>5</b> ).....	30
3.5.3. Uji Sitotoksisitas .....	30
3.5.4. Analisa Siklus Sel .....	31
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....	35
4.1. Sintesis Senyawa Turunan Hiptolida ( <b>5</b> ).....	35
4.2. Identifikasi Struktur Hasil Sintesis.....	37
4.2.1. Identifikasi Struktur dengan Spektrometer NMR.....	37
4.2.2. Identifikasi Struktur dengan Spektrometer IR.....	39
4.2.3. Identifikasi Struktur dengan TLC-MS .....	40
4.3. Uji Sitotoksisitas Senyawa Hasil Sintesis .....	42
4.4. Studi Interaksi dan Dinamika Molekul Senyawa Hasil Sintesis.....	45
4.4.1. Preparasi Ligan dan Reseptor .....	45
4.4.2. Simulasi <i>Molecular Docking</i> Ligan Hyptolida dan Turunannya dengan Protein HDAC .....	47

4.4.3. Simulasi Dinamika Molekul Kompleks HDAC...Hiptolida dan Turunannya.....	53
4.4.4. Jarak Ikatan Kompleks HDAC...Hiptolida dan Turunannya serta HDAC...Asam Hidroksamat.....	61
4.4.5. Energi Bebas Ikatan Kompleks HDAC...Hiptolida dan Turunannya serta HDAC...Asam Hiroksamat .....	63
4.4.6. Energi Potensial Kompleks HDAC...Hiptolida dan Turunannya serta HDAC...Asam Hiroksamat.....	65
4.4.7. Nilai RMSD Kompleks HDACHiptolida dan Turunannya serta HDAC...Asam Hiroksamat.....	68
4.5. Perhitungan Hasil Simulasi <i>Docking</i> Ligan dengan Sisi Aktif Reseptor menggunakan Kuantum .....	71
BAB V KESIMPULAN .....	75
DAFTAR PUSTAKA .....	76
LAMPIRAN .....	84