

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR.....	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
DAFTAR SIMBOL	xii
DAFTAR SINGKATAN	xiii
GLOSARIUM	xiv
ABSTRAK	xvi
<i>ABSTRACT</i>	xvii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1. Latar Belakang.....	1
I.2. Rumusan Masalah	4
I.3. Tujuan Penelitian.....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	6
II.1. Kanker Leukemia	6
II.2. Mekanisme Apoptosis	6
II.3. Protein <i>Beta-Cell Lymphoma</i> (BCL-2).....	9
II.4. Andaliman Sumatera	11
II.4.1. Geraniol	12
II.4.2. Geranil Asetat	13
II.4.3. Limonen.....	14
II.5. Venetoclax.....	15
II.6. ADMET	16
II.7. Kimia Komputasi	17
II.7.1. Mekanika Klasik.....	17
II.7.2. Mekanika Kuantum	18
II.8. <i>Molecular Docking</i>	19

II.9.	Dinamika Molekul.....	20
II.10.	Interaksi Antarmolekul	21
II.10.1.	Ikatan Hidrogen.....	22
II.10.2.	Interaksi Hidrofobik	23
II.10.3.	Interaksi van der Waals	23
II.11.	Energi Potensial.....	24
II.12.	Root Mean Square Deviation (RMSD)	24
II.13.	Radius Girasi	25
II.14.	Energi Bebas Ikatan (ΔG_{bind}).....	26
II.15.	<i>Solvent Accesability Surface Area (SASA)</i>	26
II.16.	<i>Root Means Square Fluctuation (RMSF)</i>	27
II.17.	<i>Density Functional Theory (DFT)</i>	27
II.18.	Orbital Molekul	29
BAB III METODE PENELITIAN		31
III.1.	Tempat dan waktu pelaksanaan	31
III.2.	Alat dan Bahan	31
III.2.1.	Alat	31
III.2.2.	Bahan.....	31
III.3.	Variabel Penelitian.....	32
III.3.1.	Variabel bebas.....	32
III.3.2.	Variabel terikat	32
III.3.3.	Variabel tetap.....	32
III.4.	Cara Kerja.....	33
III.4.1.	Analisis ADMET	33
III.4.2.	Simulasi Reseptor (R) dengan Dinamika Molekul.....	33
III.4.3.	Optimasi Ligan (L) dengan Mekanika Kuantum.....	33
III.4.4.	<i>Molecular Docking</i> Kompleks (R...L).....	34
III.4.5.	Dinamika Molekul Protein Kompleks (R...L)	35
BAB IV HASIL & PEMBAHASAN		36
IV.1.	Analisis ADMET	36
IV.2.	Simulasi Reseptor dengan Dinamika Molekul (MD).....	40

IV4.	<i>Molecular Docking</i>	47
IV41.	Kompleks BCL2X...G	47
IV42.	Kompleks BCL2X...GA	50
IV43.	Kompleks BCL2X...LM	52
IV44.	Kompleks BCL2X...V	54
IV5.	Analisis Dinamika Molekular Kompleks	57
IV51.	Energi Total Potensial	59
IV52.	RMSD	60
IV53.	RMSF	62
IV54.	Analisis Radius Girasi	64
IV55.	Analisis <i>Solvent Accessible Surface Area</i> (SASA)	65
IV56.	Energi Bebas Ikatan	67
IV57.	Analisis Struktur Sekunder	69
BAB V	PENUTUP	74
V1.	Kesimpulan	74
V2	Saran	74
DAFTAR	PUSTAKA	74
LAMPIRAN		84