

GLOSARIUM

6-31++G**.	: Salah satu basis set yang digunakan untuk perhitungan kimia komputasi.
ω B97M-V	: Salah satu fungsi korelasi yang sangat baik untuk menunjukkan energi reaksi, ikatan hidrogen, interaksi nonkovalen, geometri molekul, dan energi konformasi.
Adsorpsi GI	: Kemampuan suatu senyawa untuk diserap dari saluran pencernaan (<i>gastrointestinal tract</i>), terutama di usus halus ke dalam aliran darah setelah diminum.
AMES mutagenisitas	: Metode untuk mengetahui apakah suatu senyawa dapat menyebabkan mutasi genetik.
Basis set	: Kumpulan fungsi matematika yang digunakan untuk menggambarkan orbital elektron suatu molekul.
CL _{plasma}	: Volume plasma yang "dibersihkan" dari obat per satuan waktu.
Fu	: Fu (<i>fraction unbound</i>) menunjukkan fraksi obat yang tidak terikat protein plasma dan tersedia untuk berinteraksi dengan target biologis.
Fungsi korelasi	: Komponen fungsi matematis dalam metode DFT yang digunakan untuk memperhitungkan energi korelasi elektron akibat interaksi dan gerakan antarelekttron.
Fluktuasi	: Perubahan suatu nilai (energi) berupa kenaikan atau penurunan yang dapat digambarkan dengan grafik.
<i>Folding</i>	: Terjadinya proses pelipatan protein melalui ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik, interaksi elektrostatis, atau ikatan disulfida yang terdapat pada struktur protein.
Genotoksisitas	: Kemampuan suatu senyawa merusak materi genetik (DNA atau kromosom).
GOAT	: Algoritma pencarian global yang tersedia dalam paket ORCA untuk menemukan konformasi paling stabil suatu molekul.
Gridbox	: Kubus yang digunakan untuk menutupi sisi aktif makromolekul atau kompleks yang akan disimulasikan menggunakan <i>molecular docking</i> dan dinamika molekul.
Homeostasis	: Kemampuan tubuh mempertahankan kondisi internal tetap stabil meskipun lingkungan berubah.
Inhibitor CYP3A4	: Enzim yang memetabolisme 50-60% obat yang beredar di pasaran, contohnya simvastatin, midazolam, dan amlodipine.

Inhibitor CYP2B6	: Enzim yang memetabolisme sekitar 20-25% obat klinis, seperti codeine, metoprolol, dan fluoxetine.
LogP	: Logaritma ukuran lipofilisitas suatu senyawa.
LogS	: Logaritma kelarutan senyawa dalam air (<i>aqueous solubility</i>) yang menunjukkan seberapa mudah suatu senyawa larut dalam air, sebelum diserap tubuh.
Permeabilitas BBB	: Prediksi permeabilitas lapisan pelindung yang memisahkan darah dan jaringan otak.
Permeabilitas Caco-2	: Prediksi permeabilitas usus.
Plateau	: Keadaan datar setelah sebelumnya mengalami peningkatan atau penurunan.
PPB	: <i>Plasma protein binding digunakan</i> untuk menunjukkan seberapa kuat obat berikatan dengan protein plasma.
Proliferasi	: Proses penambahan jumlah sel melalui pembelahan sel.
Simulasi	: Proses penggunaan model atau representasi untuk meniru perilaku sistem nyata.
Substrat P-gp	: Protein transporter membran yang berfungsi sebagai pompa efluks (<i>efflux pump</i>) yang akan mengeluarkan senyawa dari dalam sel ke luar sel menggunakan energi dari ATP.
TIP3P	: Model pelarut air yang digunakan dalam metode dinamika molekul.
Trayektori	: Hasil simulasi berupa perubahan konformasi atau energi terhadap waktu.
xTB	: Metode semiempiris berbasis <i>tight-binding</i> yang dikembangkan oleh tim Stefan Grimme.