

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI	v
DAFTAR TABEL.....	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR LAMPIRAN.....	xi
ABSTRAK.....	xii
<i>ABSTRACT</i>	xiii
SINGKATAN	xiv
GLOSARIUM.....	xvi
BAB I PENDAHULUAN.....	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	5
II.1 <i>Blood Brain Barrier</i>	5
II.2 <i>Adherens Junction</i>	6
II.3 Struktur 3D <i>E-cadherin</i>	7
II.4 Modulasi <i>Junction</i> antar Sel.....	8
II.5 Kitosan	11
II.6 Peptida ADTC5 (Ac-CDTPPVC-NH ₂).....	13
II.7 Vitamin C.....	13
II.8 <i>Molecular Docking</i>	14
II.9 Dinamika Molekul	17
II.10 Interaksi Antarmolekul	18

II.10.1. Ikatan Hidrogen	19
II.10.2. Interaksi Hidrofobik.....	20
II.11 Energi Interaksi.....	20
II.12 Energi Total Potensial.....	21
II.13 RMSD (<i>Root Mean Square Deviation</i>).....	22
II.14 Energi Bebas ikatan	23
BAB III METODE PENELITIAN.....	25
III.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....	25
III.2 Alat dan Bahan.....	25
III.2.1 Alat.....	25
III.2.2 Bahan	25
III.3 Variabel Penelitian.....	26
III.3.1 <i>Molecular Docking</i> dan Simulasi Dinamika Molekul	26
III.3.2 <i>Sequential docking</i>	26
III.4 Prosedur Penelitian	27
III.4.1 Dinamika Molekul Protein <i>E-cadherin</i> Domain EC1 – EC2.....	27
III.4.2 <i>Molecular Docking</i>	28
III.4.3 Dinamika Molekul	29
III.4.4 <i>Sequential Docking</i>	30
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	32
IV.1 Dinamika Molekul Protein <i>E-cadherin</i> Domain EC1-EC2	32
IV.2 <i>Molecular Docking</i>	34
IV.3 Dinamika Molekul	39
IV.3.1 Kompleks EC1-EC2 dengan Cs.....	39
IV.3.2 Kompleks EC1-EC2 dengan ADTC5	45

IV.3.3 Kompleks EC1-EC2 dengan Vitamin C	51
IV.4 <i>Sequential Docking</i>	57
IV.4.1 Kompleks <i>E-cadherin</i> Domain EC1 – EC2 dengan Kitosan, ADTC5, dan Vitamin C.....	58
IV.4.2 Kompleks <i>E-cadherin</i> Domain EC1 – EC2 dengan ADTC5, Vitamin C dan Kitosan	61
BAB V PENUTUP.....	65
V.1 Kesimpulan	65
V.2 Saran	65
DAFTAR PUSTAKA	66
LAMPIRAN.....	73