

## DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN .....	ii
KATA PENGANTAR .....	iii
DAFTAR ISI .....	v
DAFTAR TABEL .....	viii
DAFTAR GAMBAR.....	ix
DAFTAR LAMPIRAN .....	xi
DAFTAR SIMBOL .....	xii
GLOSARIUM.....	xiii
ABSTRAK.....	xiv
ABSTRACT .....	xv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
I.1 Latar Belakang .....	1
I.2 Tujuan Penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA .....	4
II.1 <i>Blood Brain Barrier</i> .....	4
II.2 Cadherin dan Modulasi Junction Antar Sel.....	5
II.3 Kitosan .....	8
II.4 Kimia Komputasi .....	10
II.5 <i>Molecular Docking</i> .....	11
II.6 Dinamika Molekul.....	13
II.7 Interaksi Antarmolekul.....	14
II.7.1 Ikatan Hidrogen.....	15

II.7.2	Interaksi Hidrofobik.....	16
II.7.3	Interaksi van der Waals.....	16
II.7.4	Interaksi Ionik .....	17
II.8	Energi Potensial.....	18
II.9	<i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD) .....	18
II.10	Radius Girasi (Rg).....	19
II.11	Energi Bebas Ikatan ( $\Delta G_{bind}$ ) .....	20
BAB III METODOLOGI PENELITIAN .....		21
III.1	Waktu dan Tempat Penelitian .....	21
III.2	Alat dan Bahan .....	21
III.1	Alat.....	21
III.2	Bahan.....	21
III.3	Variabel Penelitian .....	21
III.3.1	Variabel Tetap.....	21
III.3.2	Variabel Berubah .....	22
III.3.3	Variabel Terukur .....	22
III.4	Cara Kerja .....	22
III.4.1	Dinamika Molekul Protein <i>E-cadherin</i> Domain EC1-EC2 .....	22
III.4.2	<i>Molecular Docking</i> Protein EC1-EC2...Cs .....	23
III.4.3	Dinamika Molekul Protein Kompleks EC1-EC2...Cs.....	24
BAB IV PEMBAHASAN .....		26

IV.1 Dinamika Molekul Protein <i>E-cadherin</i> Domain EC1-EC2.....	26
IV.2 <i>Molecular Docking</i> Protein <i>E-cadherin</i> Domain EC1-EC2 dengan Cs....	30
IV.3 Dinamika Molekul Kompleks Protein EC1-EC2...Cs.....	31
IV.3.1 Energi Potensial .....	31
IV.3.2 <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD).....	33
IV.3.3 Radius Girasi.....	35
IV.3.4 Energi Bebas Ikatan ( $\Delta G_{bind}$ ).....	36
IV.3.5 Perubahan Interaksi Selama Simulasi .....	38
BAB V PENUTUP .....	46
V.1 Kesimpulan.....	46
V.2 Saran.....	46
DAFTAR PUSTAKA.....	47
LAMPIRAN .....	53