

ABSTRAK

Pengobatan penyakit otak sulit dilakukan karena adanya penghalang antara pembuluh darah dengan otak pada jalur paraseluler yaitu *Blood Brain Barrier* (BBB). Pada jalur ini terdapat protein penghalang yang terbentuk karena interaksi antar *E-cadherin*. Porositas pada jalur paraseluler dapat ditingkatkan dengan penambahan peptida untuk memodulasi interaksi *E-cadherin...E-cadherin* pada *adherens junction* (AJ). Fungsi peptida sebagai modulator dapat ditingkatkan dengan kitosan (Cs) sebagai pengenkapsulasi. Cs digunakan sebagai penghantar obat ke sel karena sifatnya *biocompatible*, *biodegradable*, dan memiliki gugus aktif -NH₂ dan -OH yang dapat berinteraksi dengan bagian anionik membran sel endotelial BBB pada otak. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan pengaruh situs interaksi, jarak interaksi dan energi interaksi terhadap kompleks EC1-EC2...Cs. Selain itu, menentukan kestabilan kompleks EC1-EC2...Cs dengan pengaruh temperatur mesofilik dan termofilik.

Reseptor yang digunakan adalah protein *E-cadherin* domain EC1-EC2. Ligan yang digunakan adalah segmen polimer Cs dengan 5 monomer (pentamer). Interaksi kompleks EC1-EC2...Cs dihitung secara *in silico* menggunakan metode mekanika molekul. Perhitungan dilakukan dua tahap yaitu *molecular docking* dan *dinamika molekul* (MD) menggunakan software YASARA pada temperatur 300 K, 305 K, 310 K, 315 K, dan 320 K selama 50 ns. Analisis hasil pada penelitian ini yaitu nilai energi interaksi, situs ikatan, jarak interaksi, total energi potensial, *Root Mean Square Deviation* (RMSD), radius girasi (Rg), energi bebas ikatan, dan perubahan interaksi protein-ligan selama simulasi.

Energi interaksi kompleks EC1-EC2...Cs adalah -30,12 kJ/mol pada temperatur 310 K (37°C). Stabilitas konformasi kompleks EC1-EC2...Cs menunjukkan bahwa pada temperatur 310 K merupakan konformasi yang paling stabil, dengan nilai radius girasi terendah sebesar 2,739 nm, nilai RMSD terendah sebesar 8,162 Å, dan nilai energi bebas ikatan terendah sebesar -338,218 kJ/mol.