

## DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	i
KATA PENGANTAR .....	ii
DAFTAR ISI.....	iv
DAFTAR TABEL.....	viii
DAFTAR GAMBAR .....	ix
DAFTAR LAMPIRAN.....	xii
ABSTRAK .....	xiii
<i>ABSTRACT</i> .....	xiv
DAFTAR SINGKATAN .....	xv
GLOSARIUM.....	xvii
BAB I.....	1
PENDAHULUAN .....	1
I.1 Latar Belakang.....	1
I.2 Rumusan Masalah.....	6
I.3 Tujuan Penelitian .....	6
BAB II.....	7
TINJAUAN PUSTAKA .....	7
II.1 Blood Brain Barrier (BBB) .....	7
II.2 Modulasi <i>Junction</i> Antar Sel.....	8
II.3 <i>Cadherin</i> .....	13

II.4 Peptida ADTC5 (Ac-CDTPPVC-NH <sub>2</sub> ) .....	15
II.5 Trimethyl Chitosan (TMCs) .....	17
II.6 Vitamin C .....	20
II.7 <i>Molecular Docking</i> .....	23
II.8 <i>Molecular Dynamic</i> .....	28
II.9 Interaksi Antarmolekul .....	29
II.10 Ikatan Hidrogen .....	30
II.11 Interaksi Hidrofobik .....	31
II.12 Interaksi Ionik .....	32
II.13 Energi Interaksi .....	32
II.14 Total Energi Potensial .....	33
II.15 <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD) .....	35
II.16 Energi Bebas Ikatan .....	36
BAB III .....	37
METODOLOGI PENELITIAN .....	37
III. 1 Waktu dan Tempat Penelitian .....	37
III. 2 Alat dan Bahan .....	37
III.2.1 Alat .....	37
III.2.2 Bahan .....	37
III.3 Variabel Penelitian .....	38

III.3.1 <i>Molecular docking</i> dan <i>Molecular dynamics</i> Protein <i>E-cadherin</i> domain EC1-EC2 dengan ADTC5, EC1-EC2 dengan TMCs dan EC1-EC2 dengan Vitamin C .....	38
III.3.2 <i>Sequential docking</i> Protein <i>E-cadherin</i> domain EC1-EC2 dengan ADTC5, TMCs dan Vitamin C .....	38
III.4 Cara Kerja .....	39
III.4.1 Persiapan Molekul TMCs .....	39
III.4.2 Optimasi Geometri Molekul .....	39
III.4.3 <i>Molecular Docking</i> protein <i>E-cadherin</i> domain EC1-EC2 dengan ADTC5, EC1-EC2 dengan TMCs dan EC1-EC2 dengan Vitamin C .....	40
III.4.4 <i>Molecular Dynamic</i> Protein <i>E-cadherin</i> domain EC1-EC2 dengan ADTC5, EC1-EC2 dengan TMCs dan EC1-EC2 dengan Vitamin C .....	42
III.4.4 <i>Sequential Docking</i> Protein <i>E-cadherin</i> domain EC1-EC2 dengan ADTC5, TMCs dan Vitamin C .....	43
BAB IV .....	45
HASIL DAN PEMBAHASAN.....	45
IV.1 Persiapan TMCs.....	45
IV.2 Optimasi Geometri Molekul TMCs.....	45
IV.3 <i>Molecular Docking</i> Protein <i>E-cadherin</i> domain EC1-EC2 dengan ADTC5, EC1-EC2 dengan TMCs dan EC1-EC2 dengan Vitamin C.....	47
IV.4 <i>Molecular Dynamic</i> Protein <i>E-cadherin</i> domain EC1-EC2 dengan ADTC5, EC1-EC2 dengan TMCs dan EC1-EC2 dengan Vitamin C .....	53
IV.5.1 Kompleks EC1-EC2...ADTC5.....	54
IV.5.2 Kompleks EC1-EC2...TMCs .....	63
IV.5.3 Kompleks EC1-EC2...Vitamin C.....	72
IV.4 <i>Sequential Docking</i> Protein <i>E-cadherin</i> domain EC1-EC2 dengan ADTC5, TMCs dan Vitamin C .....	81

BAB V.....	90
PENUTUP.....	90
V.1 Kesimpulan .....	90
V.2 Saran.....	91
DAFTAR PUSTAKA .....	92
LAMPIRAN.....	101