

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR GAMBAR.....	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR ISTILAH	xi
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	xiii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	4
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian.....	5
1.5 Manfaat Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	6
2.1 Penyakit Alzheimer dan Pengobatannya.....	6
2.2 Memantin	7
2.3 Tantangan Obat Oral	8
2.4 Sawar Darah Otak atau <i>Blood-Brain Barrier</i> (BBB)	9
2.5 Sistem Penghantar Obat (SPO) dan Penargetan pada Sistem Saraf Pusat (SSP).....	10
2.6 <i>Nanocage</i> Al₁₂N₁₂.....	11
2.7 Adsorpsi	12
2.8 Doping	13
2.9 Kimia Komputasi	14
2.10 Mekanika Kuantum	15
2.11 Teori Fungsional Kerapatan	15
2.12 ORCA <i>Docker</i>.....	16
2.13 r²SCAN-3c.....	16
2.14 <i>Frontier Molecular Orbital</i> (FMO).....	17
2.15 <i>Density of States</i> (DOS)	17
2.16 <i>Time-Dependent Density Functional Theory</i> (TDDFT)	17

2.17	<i>Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM)</i>	18
2.18	<i>Noncovalent Interaction–Reduced Density Gradient (NCI– RDG)</i> ..	18
2.19	<i>Interaction Region Indicator (IRI)</i>	19
2.20	<i>Independent Gradient Model Based on Hirshfeld Partition (IGMH)</i> 19	
2.21	<i>Electrostatic Potential (ESP)</i>	19
BAB III	METODE PENELITIAN	20
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	20
3.2	Bahan, Alat, dan Instrumentasi	20
3.2.1	Perangkat Keras (<i>Hardware</i>)	20
3.2.2	Perangkat Lunak (<i>Software</i>).....	20
3.2.3	Molekul	21
3.3	Prosedur	21
3.3.1	Pemodelan Struktur 3D Molekul	22
3.3.2	<i>Docking</i> Dopan dan Obat	22
3.3.3	Optimasi Geometri dan Analisis Lanjutan	23
3.3.4	Perhitungan TDDFT dan Analisis.....	25
BAB IV	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	26
4.1	Parameter Struktur	26
4.2	Energi Adsorpsi dan Parameter Termodinamika	31
4.3	<i>Frontier Molecular Orbital (FMO)</i>	32
4.4	<i>Density of States (DOS)</i>	38
4.5	Analisis UV-Vis	41
4.6	<i>Quantum Theory of Atom in Molecules (QTAIM)</i>	45
4.7	<i>Noncovalent Interaction – Reduced Density Gradient (NCI – RDG)</i> 48	
4.8	<i>Interaction Region Indicator (IRI)</i>	49
4.9	<i>Independent Gradient Model on Hirshfeld Partition (IGMH)</i>	49
4.10	<i>Electrostatic Potential (ESP)</i>	51
4.11	Efek Pelarut	53
4.12	Waktu Pemulihan	54
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	56
5.1	Kesimpulan	56
5.2	Saran	57
	DAFTAR PUSTAKA	58
	SUBJEK INDEKS	64

LAMPIRAN A	65
LAMPIRAN B	71
LAMPIRAN C	85
LAMPIRAN D	88
LAMPIRAN E	98
LAMPIRAN F	100
LAMPIRAN G	105
LAMPIRAN H	107
LAMPIRAN I	108

