

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL KESTABILAN IKATAN HIDROGEN ANTARA 3-(5-KLORO-2,4 DIHIDROKSIFENIL)-N-(4-FLUOROFENIL) PIRAZOL-4-KARBOKSAMIDA DENGAN PROTEIN p53 DALAM AIR SEBAGAI INHIBITOR KANKER**

Hendrik Setiawan  
12/331146/PA/14462

**INTISARI**

Analisis kestabilan ikatan hidrogen antara senyawa 3-(5-kloro-2,4-dihidroksifenil)-N-(4-fluorofenil) pirazol-4-karboksamida (CDFP) dengan protein p53 dalam air menggunakan simulasi dinamika molekul. Konformasi awal kompleks CDFP-p53 dibuat melalui penambatan molekul untuk aktivitas antikanker. Konformasi terbaik diambil untuk mengetahui interaksi yang terjadi antara ligan CDFP dengan protein p53 di dalam air melalui simulasi dinamika molekul.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa konformasi kompleks CDFP-p53 hasil penambatan molekul yang paling stabil memiliki energi bebas ikatan sebesar -95,718 kJ/mol menunjukkan terdapat ikatan hidrogen pada asam amino THR135, LEU50, dan PRO56. Hasil simulasi dinamika molekul menunjukkan bahwa ikatan hidrogen yang paling stabil pada residu asam amino THR135. Residu asam amino THR135 merupakan yang berperan penting dalam aktivitas pada pertumbuhan kanker, sehingga ligan CDFP ini dapat diprediksi memiliki aktivitas antikanker.

Kata kunci: Pirazol, antikanker, protein p53, penambatan molekul, simulasi dinamika molekul.

***MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF HYDROGEN BONDS STABILITY  
BETWEEN 3-(5-CHLORO-2,4-DIHYDROXYPHENYL)-N-(4-FLUOROPHENYL)  
PYRAZOLE-4 CARBOXAMIDE WITH p53 PROTEIN IN WATER AS CANCER  
INHIBITOR***

Hendrik Setiawan  
12/331146/PA/14462

**ABSTRACT**

Analysis of hydrogen bond stability in 3-(5-chloro-2,4-dihydroxyphenyl)-N-(4-fluorophenyl) pyrazole-4-carboxamide (CDFP) with p53 protein in water has been performed using molecular dynamics simulation. Conformation of CDFP-p53 complex was determined by molecular docking for possible anticancer activity. The best conformation was used in the molecular dynamics simulation to study the stability of interaction between CDFP ligand and p53 protein in water.

The result showed the most stable CDFP-p53 complex conformation has binding free energy of -97.718 kJ/mol showing hydrogen bonds of THR135, LEU50, and PRO56 amino acids. The result showed the most stable hydrogen bonding is at THR135 amino acid residue. Due to the important role of THR135 residue in inhibition activity to cancer growth, CDFP compound can be predicted to have an anticancer activity.

**Keywords:** Pyrazole, anticancer, p53 protein, molecular docking, molecular dynamics simulation.