

## **STUDI INTERAKSI ION $\text{Ca}^{2+}$ PADA ENZIM FOSFOLIPASE A<sub>2</sub> (PLA<sub>2</sub>) DARI BISA ULAR KOBRA (*Naja naja*) MELALUI KAJIAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

Thomas Indra Kurniarta Sihaloho  
14/368664/PA/16301

### **INTISARI**

Telah dilakukan penelitian simulasi dinamika molekul ion  $\text{Ca}^{2+}$  dengan enzim PLA<sub>2</sub>1A dalam pelarut air. Penelitian dilakukan bertujuan untuk mempelajari interaksi antara ion  $\text{Ca}^{2+}$  dengan enzim PLA<sub>2</sub>1A, struktur hidrasi ion  $\text{Ca}^{2+}$  dan stabilitas kompleks  $\text{Ca}^{2+}$ -PLA<sub>2</sub>1A dalam pelarut air. Penelitian dilakukan dengan metode simulasi dinamika molekul pada situs ikat ion enzim pada residu tyr27, gly29, gly31, dan asp48. Simulasi dilakukan menggunakan perangkat lunak GROMACS dengan kondisi kotak simulasi berbentuk kubus dan model air SPC, berlangsung pada kondisi 1 atm, suhu 300 K, dan selama 10 ns. Analisis yang dilakukan ialah berupa analisis RMSD (*Root Mean Square Deviation*), RDF (*Radial Distribution Function*), jarak gyration, ikatan hidrogen, dan hidrasi air.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa Ikatan hidrogen pada situs ikat kompleks  $\text{Ca}^{2+}$ -PLA<sub>2</sub>1A dengan air cenderung lemah dibandingkan ikatan kovalen koordinasi sehingga kompleks cenderung stabil dalam pelarut air, bilangan koordinasi ion  $\text{Ca}^{2+}$  dalam penelitian ini adalah 6 dengan jarak 2,56 Å, dan ikatan kovalen koordinasi antara ion  $\text{Ca}^{2+}$  dengan atom O residu asam amino membentuk kompleks  $\text{Ca}^{2+}$ -PLA<sub>2</sub>1A yang stabil selama 1 ns.

Kata Kunci: dinamika molekul, enzim PLA<sub>2</sub>1A, hidrasi, ion  $\text{Ca}^{2+}$ , simulasi

## **INTERACTION STUDY OF Ca<sup>2+</sup> ION WITH PHOSPHOLIPASE A<sub>2</sub> (PLA<sub>2</sub>) ENZYME FROM COBRA SNAKE (*Naja naja*) VENOM WITH MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION**

Thomas Indra Kurniarta Sihaloho  
14/368664/PA/16301

### **ABSTRACT**

Molecular dynamic simulation of Ca<sup>2+</sup> ion with PLA<sub>2</sub>1A enzyme has been done. The aim of this research is to study interaction between Ca<sup>2+</sup> ion with PLA<sub>2</sub>1A enzyme in water, determine the structure of the Ca<sup>2+</sup> ion hydration, and its stability in water. The task was carried out using molecular dynamics technique and done at active site of enzyme, tyr27, gly29, gly31, asp48. Simulation was done using GROMACS, conducted in cubic box with SPC water model, and also configured at 1 atm pressure and 300 K temperature for 10 ns. Analysis of RMSD (*Root Mean Square Deviation*), RDF (*Radial Distribution Function*), gyration, hydrogen bond, and hydration structure were used.

The results showed that Ca<sup>2+</sup> ion and O atom from amino acid residue form Ca<sup>2+</sup>-PLA<sub>2</sub>1A complex by covalent coordination bond, hydrogen bond at binding site of complex is weaker than covalent coordination, Ca<sup>2+</sup> ion hydrated by 6 water molecules with distance between Ca<sup>2+</sup>-O is 2,56 Å and covalent coordination bond between Ca<sup>2+</sup> and O atom from amino acid form a stable Ca<sup>2+</sup>-PLA<sub>2</sub>1A complex for 1 ns.

Keywords: Ca<sup>2+</sup> ion, enzyme PLA<sub>2</sub>1A, hydration, molecular dynamic, simulation