

## INTISARI

### Perbandingan Struktur dan Dinamika Kompleks Antioksidan Quercetin dan Kaempferol *Tyrosine Kinase* dengan Pendekatan Simulasi Dinamika Molekular

Adi Tiara Zikri  
12/334610/PA/14843

Perbandingan struktur dan dinamika kompleks antioksidan quercetin dan kaempferol *tyrosine kinase* telah dilakukan dengan pendekatan simulasi dinamika molekular. Penelitian bertujuan untuk melihat interaksi yang terjadi antara quercetin dan kaempferol dengan protein *tyrosine kinase* dalam pelarut air.

Tahapan pertama penelitian ini adalah *redocking* senyawa quercetin dengan protein *tyrosine kinase*, kemudian dilanjutkan dengan *docking* kaempferol dengan protein *tyrosine kinase*. Konformasi dari *redocking* dan *docking* diminimasi untuk mencari energi minimisasi masing-masing kompleks, kemudian diekuilibrasikan *canonical* pada temperatur 300 K dan disampling pada keadaan isobar-isoterm. Hasil sampling dianalisis untuk memprediksi dinamika dari quercetin dan kaempferol untuk menentukan energi bebas solvasi dari masing-masing sistem.

Hasil simulasi berupa perubahan struktur dan dinamika yang terjadi antara ligan dengan protein dalam pelarut air. Kaempferol telah mencapai kestabilan dari awal simulasi, sedangkan quercetin mencapai kestabilan ketika simulasi sudah melebihi 3000 ps.

Kata kunci : quercetin, kaempferol, *molecular docking*, simulasi dinamika molekular

## ABSTRACT

### **Structure and Dynamics Comparison of Complex Antioxidant Quercetin and Kaempferol Tyrosine Kinase Using Molecular Dynamics Simulation Approach**

Adi Tiara Zikri

12/334610/PA/14843

Structure and dynamics comparison of complex antioxidant quercetin and kaempferol tyrosine kinase using molecular dynamics simulation approach has been done. The purpose of this research is to observe the structure and dynamic that happened between quercetin as well as kaempferol and tyrosine kinase protein in a water solvent.

The first step in this research is redocking quercetin with tyrosine kinase protein then docking the kaempferol with tyrosine kinase protein. Conformation from redocking and docking are minimized to determine the minimization energy in each system. After that, canonical equilibrated at 300 K and sampled at isobar-isotherm condition. The sampling result analyzed to predict the dynamic of quercetin and kaempferol and calculate the solved free energy from each system.

The result of simulation are the structure and dynamic change that happened between ligand and protein in the solvent. kaempferol has achieved stability from the beginning of the simulation, whereas quercetin achieve stability when the simulation has exceeded 3000 ps.

Keywords: quercetin, kaempferol, molecular docking, molecular dynamic