

STUDI INTERAKSI QUINPIROLE DENGAN RESEPTOR DOPAMIN D3 MENGGUNAKAN METODE DOCKING MOLEKULER DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

Dini Fitriani
09/283314/PA/12515

INTISARI

Docking molekuler dan simulasi dinamika molekuler ETQ (*Eticlopride*) dan *quinpirole* dengan reseptor dopamine D3 (protein) telah dilakukan. *Docking* molekuler dilakukan untuk mencari RMSD ETQ berdasarkan kemiripannya dengan ETQ eksperimen. *Docking* molekuler *quinpirole* dilakukan untuk menentukan konformasi terbaik dengan metode *scoring*. Simulasi dinamika molekuler dilakukan untuk memprediksi kelarutan dan kompleks protein- dalam pelarut air dengan metode *Free Energy Perturbation (FEP)*. RMSD (*Root Mean Square Deviation*) dihitung untuk mengetahui perubahan struktur protein yang terjadi selama simulasi dinamika molekuler berlangsung dalam keadaan NPT(*constant Number of particles, Volume and Pressure*). Ekuilibrase dilakukan dalam dua tahap. Tahap pertama dilakukan dalam kondisi NVT (*constant Number of particles, Volume and Temperature*). Tahap kedua dilakukan dalam kondisi NPT.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa *docking* molekuler ETQ memiliki RMSD 0,59 Å. Konformasi pertama *quinpirole* memiliki *score* yang paling rendah yaitu -77,42 kJ/mol dan merupakan konformasi terbaik. Berdasarkan penelitian untuk hasil *docking* *quinpirole* didapat 2 ikatan hidrogen dengan jarak 1,9 Å dan 2,6 Å. Hasil simulasi dinamika molekuler untuk estimasi energi bebas solvasi dalam air pada *quinpirole* sebesar $-176,66 \pm 0,25$ kJ/mol. Kelarutan ETQ lebih tinggi dibandingkan dengan kelarutan *quinpirole* disebabkan karena ETQ memiliki kemungkinan lebih banyak untuk dapat membentuk ikatan hidrogen dengan pelarut.

Kata kunci: *Docking* molekuler, simulasi dinamika molekuler, *eticlopride*, *quinpirole*, RMSD

***INTERACTION STUDY OF QUINPIROLE WITH DOPAMINE D3
RECEPTOR USING MOLECULAR DOCKING METHOD AND
MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION***

Dini Fitriani
09/283314/PA/12515

ABSTRACT

Molecular docking and molecular dynamics simulation eticlopride and quinpirole d with dopamine D3 receptor have been conducted. Molecular docking was conducted to look for RMSD ETQ d based on its similarity to the d ETQ experiments. Molecular docking of quinpirole d use scoring method to determine the best conformation. Molecular dynamics simulations performed to predict the solubility of the d and protein-d complexes in aqueous solvent with free energy perturbation method (FEP) in NPT state. RMSD (Root Mean Square Deviation) was calculated to determine the protein structure changes during molecular dynamics simulations in NPT (constant Number of particles, Volume and Pressure) state. Equilibration is often conducted in two phases. The first phase is conducted under an NVT (constant Number of particles, Volume, and Temperature). The second phase is conducted under an NPT.

The results showed that the RMSD of ETQ d molecular docking is 0,59 Å. Quinpirole first conformation has the lowest score is -77,42 kJ/mol is the best conformation of quinpirole. Based on the research for the results obtained docking quinpirole 2 hydrogen bonds with a distance of 1,9 Å and 2,6 Å. Result of molecular dynamics simulation the estimates solvation free energy in water for quinpirole is $-176,66 \pm 0,25$ kJ / mol. ETQ solubility is higher than the quinpirole solubility due ETQ more likely to be able to form hydrogen bonds with the solvent

Key words: Molecular docking, molecular dynamics simulation, eticlopride, quinpirole, RMSD