STUDI HIDRASI DAN INTERAKSI ION K^+ DENGAN KOMPLEKS TRSH-PROTEIN P53 MENGGUNAKAN METODE SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

Nabih Ahmad Kamal
12/331460/PA/14713

INTISARI

Simulasi dinamika molekuler ion K^+ dengan kompleks TRSH-protein p53 telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini adalah mempelajari interaksi antara ion K^+ dengan kompleks TRSH-protein p53 serta menentukan struktur hidrasi ion K^+. Metode yang digunakan adalah simulasi dinamika molekuler. Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan sisi aktif dari protein yang sebelumnya ditempati oleh ligan standar TRSH. Simulasi dilakukan dalam kotak simulasi berbentuk oktahedral dan tipe air SPCBOX. Dilakukan analisis berupa RMSD (*Root Mean Square Deviation)*, RDF (*Radial Distribution Function)*, ikatan hidrogen dan hidrasi air.

Hasil penelitian menunjukan bahwa interaksi antara ion K^+ dengan kompleks TRSH-protein p53 terjadi pada residu asam amino ASP169 dengan jarak interaksi 2,86 Å dan 2,91 Å. Di akhir simulasi tidak terdapat interaksi antara asam amino dengan ion K^+. Ion K^+ terhidrasi 5 molekul air dengan presentase 41,2%. Terbentuk minimal 1 ikatan hidrogen antara asam amino dari kompleks TRSH-protein p53 dengan molekul air.

Kata kunci: ion K^+, protein p53, simulasi dinamika molekuler, ligan TRSH

HYDRATION AND INTERACTION STUDY OF THE K^+ION WITH TRSH-P53 PROTEIN COMPLEX USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION METHOD

Nabih Ahmad Kamal

12/331460/PA/14713

ABSTRACT

Molecular dynamics simulation of K^+ ion with the TRSH-p53 protein complex has been done. The purposes of this research to study the interaction between K^+ion with the TRSH-p53 protein complex, determine the structure of the K^+ ion hydration. The method of molecular dynamics simulation was used.This research was conducted by using active site of the protein that was previously occupied by the standardTRSH ligand. The simulation was conducted in octahedral box with SPC of water type. The analysis of RMSD*(Root Mean Square Deviation)*, RDF(*Radial Distribution Function)*, hydrogen bond and water hydration were used.

The results indicated that the interaction between K^+ ion andTRSH-p53 protein complexoccurred while amino acid residue ASP169was in distance of2,86 Å and 2,91 Å. At the end of the simulation there was no interaction between amino acid with K^+ ion.K^+ ion hydrated by 5 molecules of water with percentage 41.2%.There was at least 1 hydrogen bond between amino acid of TRSH-p53 protein complex and water.

Keywords: K^+ ion, TRSH-p53 protein complex, molecular dynamics simulation, TRSH ligand