

SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL SENYAWA EURIKUMANOL-2-O-β- D-GLUKOPIRANOSIDA DENGAN PROTEIN PfATP6 SEBAGAI OBAT ANTIMALARIA

Syaeful Bahri

12/331452/PA/14706

INTISARI

Simulasi dinamika molekul senyawa eurikumanol-2-O-β-D-glukopiranosida (EGP) dengan protein *Plasmodium falciparum* Ca²⁺-ATPase (PfATP6) telah dilakukan untuk mengetahui interaksi yang terjadi antara ligan EGP dengan protein PfATP6. Interaksi yang terjadi diketahui melalui penambatan molekul yang berkaitan dengan aktivitas antimalaria. Setelah diketahui interaksi yang terjadi antara ligan dengan protein, konformasi terbaik ligan dengan energi terendah dan kemiripan interaksi dengan ligan standar diambil untuk mengetahui interaksi yang terjadi antara ligan dengan protein PfATP6 di dalam air melalui simulasi dinamika molekul.

Melalui tahap penambatan molekul didapatkan energi ikat terendah sebesar -84,14 kJ/mol. Ikatan hidrogen terjadi antara ligan dengan residu asam amino dari protein PfATP6, yaitu residu asam amino ASN101, GLN56, ASP254 dan GLN250. Selama simulasi kompleks dalam air tampak bahwa ikatan hidrogen antara ligan dengan residu asam amino ASN101 dan ASP254 terputus dan menyisakan ikatan hidrogen ligan dengan GLN56. Residu asam amino GLN56 merupakan salah satu residu asam amino yang berperan penting dalam aktivitas inhibisi dari parasit *Plasmodium falciparum*, sehingga ligan EGP ini dapat diprediksi memiliki aktivitas antimalaria.

Kata kunci: ligan EGP, antimalaria, protein PfATP6, penambatan molekul, simulasi dinamika molekul.

**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF EURYCOMANOL-2-O- β -
D-GLUCOPYRANOSIDE COMPOUND WITH PfATP6 PROTEIN AS
ANTIMALARIAL DRUG**

Syaeful Bahri

12/331452/PA/14706

ABSTRACT

Molecular dynamics simulation of eurycomanol-2-O- β -D-glucopyranoside (EGP) with PfATP6 protein has been performed to investigate the interaction between EGP and PfATP6. The interaction was investigated using molecular docking method, which was related to the antimalarial activity. Then, the best conformation was used in molecular dynamics simulation to know the stability of interaction between ligand and protein in the water via hydrogen bonds.

Lowest binding energy obtained from molecular docking was -84,14 kJ/mol. Hydrogen bonds occurring between ligand and amino acid residue of the PfATP6 protein, ASN101, GLN56, GLN250 and ASP254. During the simulation of the complex, it was observed that the hydrogen bond between ligand-ASN101 and ligand-ASP254 residue was broken, and the hydrogen bond between ligand and GLN56 residue still occurred. Due to GLN56 residue was one of important amino acid residue in activity inhibition of *Plasmodium falciparum* parasite, EGP compound can be predicted having an antimalarial activity.

Keywords: ligand EGP, antimalarial, PfATP6 protein, molecular docking, molecular dynamics simulation.