

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR SENYAWA N'-(7-KLORO-4-KUINOLINIL)-N-
(SIKLOPROPILMETIL)-N-PROPIl-1,3-PROPANADIAMIN DENGAN PROTEIN
PfATP6 SEBAGAI OBAT ANTIMALARIA**

Kurniawan Eka Satrya
12/334753/PA/14984

INTISARI

Simulasi dinamika molekular senyawa N'-(7-kloro-4-kuinolinil)-N-(siklopropilmetil)-N-propil-1,3-propanadiamin (KSPP) dengan protein *Plasmodium falciparum* Ca²⁺-ATPase (PfATP6) telah dilakukan untuk mengetahui interaksi yang terjadi antara ligan KSPP dengan protein PfATP6. Interaksi yang terjadi diketahui melalui penambatan molekular yang berkaitan dengan aktivitas antimalaria. Setelah diketahui interaksi yang terjadi antara ligan dengan protein, konformasi terbaik ligan dengan energi terendah diambil untuk mengetahui interaksi yang terjadi antara ligan dengan protein PfATP6 di dalam air melalui simulasi dinamika molekular.

Melalui tahap penambatan molekular didapatkan energi ikat terendah sebesar -87,82 kJ/mol, dengan 2 ikatan hidrogen terjadi antara ligan dengan residu asam amino dari protein PfATP6, yaitu residu asam amino asparagin (ASN101) dan residu asam amino glutamin (GLN56). Selama simulasi kompleks dalam air tampak bahwa ikatan hidrogen antara ligan dengan residu asam amino ASN101 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 KSPP ini dapat diprediksi memiliki aktivitas antimalaria.

Kata kunci: 4-aminokuinolin, antimalaria, protein PfATP6, penambatan molekular, simulasi dinamika molekular.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF N'-(7-CHLORO-4-QUINOLINYL)-N-(CYCLOPROPYLMETHYL)-N-PROPYL-1,3-PROPANEDIAMINE COMPOUND WITH PfATP6 PROTEIN AS ANTIMALARIAL DRUG

Kurniawan Eka Satrya
12/334753/PA/14984

ABSTRACT

Molecular dynamics simulation of N'-(7-Chloro-4-Quinoliny)-N-(Cyclopropylmethyl)-N-Propyl-1,3-Propanediamine (CCPP) with PfATP6 protein has been performed to investigate the interaction between CCPP and PfATP6. The interaction was investigated using molecular docking method, which is 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 is -87.82 kJ/mol, with 2 hydrogen bonds occurring between ligand and amino acid residue of the PfATP6 protein, ASN101 and GLN56. During the simulation of the complex, it was observed that the hydrogen bond between ligand and ASN101 residue was broken, and the hydrogen bond between ligand and GLN56 residue still occurred. Due to GLN56 residue is one of important amino acid residue in activity inhibition of *Plasmodium falciparum* parasite, CCPP compound can be predicted having an antimalarial activity.

Keywords: 4-aminoquinoline, antimalarial, PfATP6 protein, molecular docking, molecular dynamics simulation.