

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR SENYAWA ANTIMALARIA 13 β ,21-DIHIDROKSIEURIKUMANOL DENGAN PROTEIN PfATP6

Anita

11/317033/PA/114150

INTISARI

Simulasi dinamika molekular 13 β ,21-Dihidroksieurikumanol (DEK) dengan protein PfATP6 telah dilakukan untuk mempelajari pengaruh air dalam interaksi ligan DEK-PfATP6. Penambatan molekular dilakukan untuk mendapatkan konformasi terbaik dari struktur kompleks ligan-protein. Konformasi terbaik ini digunakan sebagai konfigurasi awal simulasi dinamika molekular untuk mempelajari pergerakan molekul air dalam dinamika interaksi ligan-protein.

Energi ikat terbaik yang didapat dari hasil penambatan sebesar -77,739 kJ/mol, menunjukkan 4 ikatan hidrogen dengan residu PfATP6 yang diberi nama GLN56, ASP59, ASN101 dan LEU253. Hidrasi protein dalam air menunjukkan bahwa residu tersebut terhidrasi oleh air. Selama waktu simulasi, teramati sebanyak 2-12 ikatan hidrogen terbentuk pada simulasi ligan dalam air. Simulasi kompleks dalam air menunjukkan 3 ikatan hidrogen terputus kecuali pada GLN56 dan ligan DEK. Mengingat GLN56 merupakan salah satu residu asam amino yang penting dalam aktivitas inhibisi dari parasit *P. falciparum*, maka senyawa DEK dapat diprediksi memiliki aktivitas antimalaria.

Kata kunci : 13 β ,21-Dihidroksieurikumanol (DEK), ikatan hidrogen, penambatan molekular, simulasi dinamika molekular, antimalaria

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF ANTIMALARIAL COMPOUND 13 β ,21- DIHYDROXYEURYCOMANOL WITH PfATP6 PROTEIN

Anita

11/317033/PA/14150

ABSTRACT

Molecular dynamics simulation of complex 13 β ,21-dihydroxyeuricomanol (DEK) with PfATP6 protein in water have been performed to investigate the role of water molecules in the ligand DEK-PfATP6 interaction. Molecular docking of the ligand-protein complex was done to obtain the best conformation structure of the complex. Using the best conformation, molecular dynamics simulation was start to describe the water movements in dynamics of the ligan-protein interactions.

Binding energy of the best conformation obtain from docking was -77.739 kJ/mol, showing 4 hydrogen bonds with PfATP6 residues, namely GLN56, ASP59, ASN101 and LEU253. Solvation of the protein in water showed that the residue were solvated by waters. During the simulation time, it was observed as much as 2-12 hydrogen bonds were formed in the simulation ligand in water. The simulation of the complex in water showed a broken three hydrogen bonds except for GLN56 residue and O16 of the ligand. Due to GLN56 residue is one of important amino acid residue in activity inhibition of *P. falciparum* parasite, DEK compound can be predicted having an antimalarial activity.

Keywords : 13 β ,21-dihydroxyeuricomanol, hydrogen bonding, docking, molecular dynamics simulation, antimalarial