

**KAJIAN INTERAKSI SENYAWA BRUSEANTIN DENGAN PROTEIN  
PfATP6 (*Plasmodium falciparum* ATPase-6) MENGGUNAKAN METODE  
SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER**

Hidayati Sri Afni  
11/317013/PA/14131

**INTISARI**

Kajian interaksi senyawa bruseantin dengan protein PfATP6 menggunakan metode simulasi dinamika molekul telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui struktur dan dinamika bruseantin dalam air dan kompleks PfATP6-bruseantin dalam air.

Penelitian diawali dengan proses penambatan ligan bruseantin berdasarkan sisi ikatan hasil penambatan ligan CPA pada PfATP6. Konformasi terbaik hasil penambatan ligan digunakan dalam proses simulasi dinamika molekul untuk memprediksi energi solvasi ligan bruseantin dalam air, dan sifat dinamis kompleks PfATP6-bruseantin pada kondisi NPT.

Hasil penambatan menunjukkan bahwa konformasi terbaik bruseantin memiliki energi terendah sebesar -72,38 kJ/mol. Analisis RDF dari simulasi dinamika molekul menunjukkan bahwa terdapat 11 molekul air yang terdistribusi di sekitar gugus polar bruseantin. Selama simulasi dinamika molekul bruseantin-PfATP6 dalam air, bruseantin dapat membentuk 1-3 ikatan hidrogen dengan residu asam amino dari PfATP6 (asparagin 101) dan membentuk energi ikat yang kuat ke PfATP6 ( $-129,80 \pm 1,13$  kJ/mol). Simulasi dinamika molekul juga menunjukkan hasil berupa grafik RMSD kompleks PfATP6-bruseantin yang menunjukkan kestabilan setelah 200 ps.

Kata kunci: Bruseantin, antimalaria, penambatan molekul, simulasi dinamika molekul

**STUDY ON INTERACTION OF BRUCEANTIN COMPOUND WITH  
PfATP6 PROTEIN (*Plasmodium falciparum* ATPase-6) USING  
MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION METHOD**

Hidayati Sri Afni  
11/317013/PA/14131

**ABSTRACT**

Study on interaction of bruceantin and PfATP6 using molecular dynamics simulation had been performed. The purpose of this study is to know structures and dynamics of bruceantin in waters, and PfATP6-bruceantin complex in waters.

This work started with docking bruceantin based on CPA's binding site in PfATP6. The best conformation of bruceantin-PfATP6 docking result was used in molecular dynamics simulation to predict solvation energy of bruceantin in water and dynamical properties of PfATP6-bruceantin complex in NPT condition.

The docking result showed that bruceantin best conformation has lowest energy about -72.38 kJ/mol. RDF analysis of the trajectory simulation of bruceantin in water showed that 11 water molecules are distributed around polar groups of bruceantin. During the simulation of bruceantin-PfATP6 in water, bruceantin could make 1-3 hydrogen bonds with amino acid residue of PfATP6 (asparagine 101) and has strong binding energy to PfATP6 protein ( $-129.80 \pm 1.13$  kJ/mol). Molecular dynamics simulation also results RMSD graph of PfATP6-bruceantin complex structure showing more stable after 200 ps.

Keywords: Bruceantin, antimalarial, molecular docking, molecular dynamics simulation