

KAJIAN INTERAKSI SENYAWA ANTIOKSIDAN *MYRICETIN* DENGAN RESEPTOR PROTEIN *TYROSINE KINASE* MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

Eki Riana Sutadi
11/316907/PA/14026

INTISARI

Penelitian yang mengkaji interaksi senyawa antioksidan *myricetin* dengan reseptor protein *tyrosine kinase* menggunakan simulasi dinamika molekuler telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi *binding site myricetin* pada protein reseptor *tyrosine kinase*, memprediksi energi bebas solvasi senyawa *quercetin* dan *myricetin* dalam air, dan kekuatan ikatan senyawa *quercetin* dan *myricetin* dalam protein reseptor *tyrosine kinase*.

Penelitian ini diawali dengan metode *redocking* senyawa *quercetin* yang menghasilkan informasi mengenai *binding site* dalam protein *tyrosine kinase*, *binding site* tersebut yang digunakan sebagai acuan *molecular docking* senyawa *myricetin*. Selanjutnya dilakukan simulasi dinamika molekuler pada ligan dengan konformasi paling stabil dan pada kompleks dalam air.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa *myricetin* memiliki *binding site* yang sama dengan *quercetin*. Energi solvasi *myricetin* lebih rendah dari pada *quercetin*, yakni *quercetin* $-43,30 \pm 4,92 \text{ kJ mol}^{-1}$ dan *myricetin* $-51,87 \pm 2,87 \text{ kJ mol}^{-1}$. Energi ikat *myricetin* pada protein reseptor *tyrosine kinase* lebih lemah dari pada *quercetin*, yakni *quercetin* $-55,90 \pm 1,79 \text{ kJ mol}^{-1}$ sedangkan pada *myricetin* sebesar $-41,70 \pm 1,06 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Kata kunci: *molecular docking*, dinamika molekuler, *myricetin*, ikatan hidrogen

STUDY OF INTERACTION ANTIOXIDANT COMPOUND *MYRICETIN* WITH PROTEIN *TYROSINE KINASE* RECEPTOR USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Eki Riana Sutadi
11/316907/PA/14026

ABSTRACT

Study of interaction antioxidant compound *myricetin* with protein *tyrosine kinase* receptor using molecular dynamics simulation has been performed. The research was aimed to predict binding site of *myricetin* in protein receptor *tyrosine kinase*, the solvation energy of *quercetin* and *myricetin* compounds in water, and bond strength of *quercetin* and *myricetin* compounds in protein receptor *tyrosine kinase*.

This work was started with redocking of *quercetin* compound with *tyrosine kinase*. It's to find best conformation which was used as a reference in molecular docking of *myricetin* compound. Then, it was performed molecular dynamics simulation on the ligand with the most stable conformation and the complex in water.

The result showed that *myricetin* has same binding site with *quercetin*. From the solvation energy value, *myricetin* has higher solvation than *quercetin* with the value *quercetin* $-43,30 \pm 4,92 \text{ kJ mol}^{-1}$ and *myricetin* $-51,87 \pm 2,87 \text{ kJ mol}^{-1}$. But from the bond strength value, *myricetin* has lower than *quercetin* with the values of $-41,70 \pm 1,06 \text{ kJ mol}^{-1}$ and $-55,90 \pm 1,79 \text{ kJ mol}^{-1}$, respectively.

Key words: molecular docking, molecular dynamics, *myricetin*, hydrogen bond