

KAJIAN DOCKING DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL UNTUK PENCARIAN SENYAWA ANTIKANKER TURUNAN PIPERLONGUMINE YANG MEMILIKI POTENSI SEBAGAI INHIBITOR TERHADAP RESEPTOR MAO-B (MONOAMIN OKSIDASE B)

Oleh: Suwardi, Agus Salim, Raden Rara Fadhila Kirana Nugrahani dan Yolanda Amalia

ABSTRAK

Telah dilakukan penambatan molekul piperlongmine dan turunannya dengan maksud untuk menemukan molekul yang memiliki potensi sebagai anti kanker. Sebanyak 18 ligan telah ditambatkan ke dalam protein 2v5z menggunakan program autodock4 dan autodock vina.

Langkah penelitian mencakup a) preparasi senyawa ligan dan reseptor, b) Analisis dan Visualisasi *Redocking* molekul *native Ligand*, c) Penambatan Molekul Senyawa uji turunan piperlongumine dan d) Analisis dan Visualisasi Docking Molekul senyawa uji turunan piperlongumine serta e) Simulasi Dinamika Molekul (DM) dan Analisis hasil simulasi DM. Simulasi dinamika molekul dilakukan dengan program desmond. Tahapan kerja dalam melakukan simulasi dinamika molekul dengan desmond meliputi a) preparasi kompleks reseptor-ligand, b) melakukan system setup MD, c) melakukan simulasi dinamika molekul desmond, d) melakukan analisis kualitas simulasi dan e) melakukan analisis interaksi ligand-Protein (reseptor).

Energi ikat piperlongumine dan turunan piperlongumine [$R_1 = \text{CH}_3$ dan $R_2 = \text{H}$] masing-masing adalah -8.6 kkal/mol dan -9,3 kkal/mol. Berdasarkan simulasi dinamika molekul, fraksi interaksi ikatan hidrogen didominasi oleh residu GLN 206 (88%) baik pada ligan SAG maupun turunan piperlongumine (($R_1 = \text{CH}_3$, $R_2 = \text{H}$)(93%), untuk itu molekul turunan piperlongumine ini diprediksi memiliki potensi sebagai penghambat MAO B.

Kata Kunci: *Docking molekul, piperlongumine dan turunannya, simulasi dinamika molekul*