

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian dari Pengaruh Jarak Com Mip-*Rapamycin* terhadap Ikatan Hidrogen dan Interaksi Hidrofobik Menggunakan Metode *Umbrella Sampling* dengan Kecepatan $0,005 \text{ nm ps}^{-1}$ dapat disimpulkan bahwa :

1. Ikatan hidrogen yang melibatkan residu Q81 ,I83, Y55, T76 dan S80 terputus secara bertahap seiring bertambahnya jarak antara protein MIP dan ligan *rapamycin*. Ikatan hidrogen yang paling lama bertahan residu Q81 yang terputus pada 201 ns.
2. Interaksi hidrofobik yang teramati melibatkan residu F77, W86, dan V114 dengan interaksi yang paling lama bertahan adalah interaksi antara F77 dan gugus piranosil *rapamycin*.
3. Berdasarkan waktu pelepasan interaksi selama simulasi, interaksi hidrofobik berperan lebih besar dalam mempertahankan pengikatan *rapamycin* pada protein Mip dibandingkan ikatan hidrogen. Hal ini ditunjukkan oleh interaksi hidrofobik yang bertahan hingga 210 ns, sedangkan ikatan hidrogen hanya bertahan hingga 201 ns.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil penelitian dan kesimpulan yang diperoleh maka disarankan untuk penelitian selanjutnya menggunakan desain lain namun harus tetap mempertahankan ketiga interaksi hidrofobik di atas.

DAFTAR PUSTAKA

- Ceymann, A., Horstmann, M., Ehse, P., Schweimer, K., Paschke, A.-K., Steinert, M., and Faber, C. 2008. Solution structure of the *Legionella pneumophila* Mip-rapamycin complex. *BMC Structural Biology*, 8(1): 17.
- Cunha, B.A., Burillo, A. and Bouza, E. 2016, Legionnaires' disease, *The Lancet*, 387(10016): 376–385.
- Gattuso, G., Rizzo, R., Lavoro, A., Spoto, V., Porciello, G., Montagnese, C., Cinà, D., Cosentino, A., Lombardo, C., Mezzatesta, M. L., and Salmeri, M. 2022. Overview of the Clinical and Molecular Features of *Legionella Pneumophila*: Focus on Novel Surveillance and Diagnostic Strategies. *Antibiotics*, 11(3): 5-6.
- Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. 2018. Molecular Dynamics Simulation for All. *Neuron*, 99(6): 1129-1143.
- Iliadi, V., Staykova, J., Iliadis, S., Konstantinidou, I., Sivykh, P., Romanidou, G., Vardikov, D. F., Cassimos, D., and Konstantinidis, T. G. 2022. *Legionella pneumophila*: The Journey from the Environment to the Blood. *Journal of Clinical Medicine*, 11(20): 6126.
- Joshi, D. C., Gosse, C., Huang, S.Y., & Lin, J.H. 2022. A Curvilinear-Path Umbrella Sampling Approach to Characterizing the Interactions Between Rapamycin and Three FKBP12 Variants. *Frontiers in Molecular Biosciences*, 9: 3-8.
- Kästner, J. 2011. Umbrella sampling. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 1(6): 932-942.
- Kolos, J. M., Voll, A. M., Bauder, M., and Hausch, F. 2018. FKBP Ligands Where We Are and Where to Go? *Frontiers in Pharmacology*, 9: 1425.
- Liu, Y., Yang, F., Zou, S., and Qu, L. 2019. Rapamycin: A Bacteria-Derived Immunosuppressant That Has Anti-atherosclerotic Effects and Its Clinical Application. *Frontiers in Pharmacology*, 9: 1520.
- Moehario, L., Robertus, T., Grace, Y., and Tjoa, E. 2019. Screening of *Legionella pneumophila* from water sources in the hospitals in Jakarta. *Health Science Journal of Indonesia*, 10(1): 21-26.

- Suyanto, T. 2024, Pengaruh jarak antara protein MIP dan rapamycin terhadap interaksi ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik dengan menggunakan *Umbrella Sampling*', *Skripsi*, Sarjana Farmasi, Universitas Katolik Widya Mandala, Surabaya.
- Wang, J., Wolf, R. M., Caldwell, J. W., Kollman, P. A., and Case, D. A. 2004. Development and testing of a general amber force field. *Journal of Computational Chemistry*, 25(9): 1157-1174.
- Yang, J.L., Li, D. and Zhan, X.Y. 2023, Concept about the Virulence Factor of Legionella, *Microorganisms*, 11(1): 74.