

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian dari simulasi dinamika molekul maka disimpulkan bahwa:

1. Berdasarkan hasil simulasi, semakin tinggi kecepatan tarikan maka jarak COM, semakin cepat interaksi MIP-S35D terlepas. Interaksi MIP-S35D terlepas pada waktu 27, 68, dan 283 ps masing-masing untuk kecepatan tarikan 0,01, 0,005, 0,001 nm ps⁻¹.
2. Berdasarkan hasil simulasi, semakin tinggi kecepatan tarikan maka gaya tarik menarik antara protein dan ligan yang melawan gaya luar semakin besar. Namun pada gaya interaksi untuk kecepatan 0,01, 0,005, dan 0,001 nm ps⁻¹, masing-masing adalah 410, 370, 260 kJ mol⁻¹nm⁻¹.
3. Ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik melibatkan residu R112, S113, Q81, W86, F65 dan yang terlepas S113 dan W86.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil penelitian yang diperoleh, dapat disarankan agar dilakukan simulasi lanjutan *umbrella sampling* dengan perhitungan energi bebas

DAFTAR PUSTAKA

- Abraham, M.J., Van der Spoel, D., Lindahl, E. and Hess, B. 2018, GROMACS User Manual version 2018.2, www.gromacs.org
- Ceymann, A., Horstmann, M., Ehses, 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**:1-12
- Cunha, B.A., Burillo, A., and Bouza, E. 2016, Legionnaires' disease, *The Lancet*, **387(10016)**:376-385.
- Gattuso, G., *et al.* 2022, Overview of the Clinical and Molecular Features of Legionella Pneumophila: Focus on Novel Surveillance and Diagnostic Strategies, *In Antibiotics*, **11(3)**:3-6.
- Hollingsworth, S.A. and Dror, R.O. 2018, Molecular Dynamics Dynamics Simulation for All, *In Neuron* **99(6)**: 2-3.
- Iliadi, V., Staykova, J., Iliadis, S., Konstantinidou, I., Sivykh, P., Romanidou, G., Vardikov, D.F., Cassimos, D. dan Konstantinidis, T.G. 2022, Legionella pneumophila: The Journey from the Environment to the Blood, *Journal of Clinical Medicine*, **11(6126)**: 1-18.
- Juli, C. *et al.* 2011, Pipecolic acid derivatives as small-molecule inhibitors of the legionella MIP protein, *Journal of Medical Chemistry*, **54(1)**: 277-283.
- Kästner, J. 2011, Umbrella sampling, *In Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, **1(6)**: 932-942.
- Kolos, J.M., Voll, A.M. and Hausch, M.B.A.F., 2018, FKBP Ligands-Where We Are and Where to Go?, *Frontiers in Pharmacology*, 9.
- Rasch, J., Theuerkron, M., Ünal, C., Heinsohn, N., Tran, S., Fischer, G., Weiward, M. and Steinert, M. 2015, Novel cycloheximide derivatives targeting the moonlighting protein Mip exhibit specific antimicrobial activity against Legionella pneumophila, *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, **3(41)**: 1-7.
- 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, *In J Comput Chem*, **25(9)**:1157-1174.

- Widjajakusuma, E.C., Frederica, M., Kaweono, K., Shea, A., Jawa, G.D.S.L., Kelan, Y.A., Indah, A., An'nisavia, F., Simatupang, M.Y.B., Fildzahdina. dan Setiyoningsih, D.V. 2022, Studi Perbandingan Sifat Struktur dan Dinamika Bentuk Apo dan Holo dari FKBP12 dan Mip dengan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul, *Journal Of Pharmacy Science And Practice*, **1(9)**: 24-29.
- Kolos, J.M., Voll, A.M. & Hausch, M.B.A.F., 2018, FKBP Ligands-Where We Are and Where to Go?, *Frontiers in Pharmacology*, **9(1425)**