

**SIMULASI PROTEIN ARGONAUTE DALAM  
PELARUT AIR EKSPLISIT**



**AGUS GIANTO  
2443006039**

**FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS KATOLIK WIDYA MANDALA SURABAYA  
2010**

## LEMBAR PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA ILMIAH

Demi perkembangan ilmu pengetahuan, saya menyetujui skripsi/karya ilmiah saya, dengan judul : **Simulasi Protein Argonaute dalam Pelarut Air Eksplisit** untuk dipublikasikan atau ditampilkan di internet atau media lain yaitu Digital Library Perpustakaan Unika Widya Mandala Surabaya untuk kepentingan akademik sebatas sesuai dengan Undang-Undang Hak Cipta.

Demikian pernyataan persetujuan publikasi karya ilmiah ini saya buat dengan sebenarnya.


Surabaya, 4 Agustus 2010



Agus Gianto  
2443006039

Saya menyatakan dengan sesungguhnya bahwa hasil tugas akhir ini adalah benar-benar merupakan hasil karya saya sendiri. Apabila di kemudian hari diketahui bahwa skripsi ini merupakan hasil plagiatisme, maka saya bersedia menerima sanksi berupa pembatalan kelulusan dan atau pencabutan gelar yang saya peroleh.

Surabaya, 4 Agustus 2010

  
Agus Gianto  
2443006039



**SIMULASI PROTEIN ARGONAUTE DALAM  
PELARUT AIR EKSPLISIT**

**SKRIPSI**

Diajukan untuk memenuhi sebagian persyaratan  
memperoleh gelar Sarjana Farmasi  
di Fakultas Farmasi Unika Widya Mandala Surabaya

**OLEH:  
AGUS GIANTO  
2443006039**

Telah disetujui pada tanggal 4 Agustus 2010 dan dinyatakan LULUS

Pembimbing,



Dr. phil. nat. Elisabeth Catherina W., M.Si.  
NIK. 241. 97. 0301

## ABSTRAK

### SIMULASI PROTEIN ARGONAUTE DALAM PELARUT AIR EKSPLISIT

Agus Gianto  
2443006039

Terapi gen merupakan terobosan baru dalam dunia pengobatan. Salah satu mekanismenya adalah membungkam gen agar tidak mengekspresikan gen yang jelek, abnormal, atau menyebabkan penyakit. Proses ini dimediasi oleh protein Argonaute dimana protein ini adalah kunci dari komponen RNA *induced silencing complex* (RISC). Dalam penelitian ini, paket program yang digunakan adalah GROMACS 4.0.3 dengan medan gaya GROMOS untuk mensimulasikan protein Argonaute. Molekul protein ini ditempatkan dalam kotak oktahedral dengan variasi jarak minimum periodik 1.6, 2.0, 2.4 nm yang kemudian diisi dengan molekul air SPC. Simulasi dilakukan pada temperatur 310 K, tekanan 1 atm. Pengamatan dilakukan pada sifat struktural dan sifat dinamik protein tersebut. Sifat struktural akan diwakili oleh parameter-parameter seperti jari – jari girasi, *Solvent accessible surface*, dan RMSD. Sifat dinamik protein tersebut diwakili oleh parameter RMSF. Hasil pengolahan data menunjukkan tidak ada perbedaan berarti pada ketiga simulasi.

Kata-kata kunci : Terapi gen, RISC, Protein, Protein Argonaute, Pelarut Eksplisit.

## ABSTRACT

### **SIMULATION OF PROTEIN ARGONAUTE IN EXPLICIT WATER SOLVENT**

Agus Gianto  
2443006039

Gene therapy was a new breakthrough in medical world. One mechanism was the silencing of genes that did not express the bad gene, abnormal, or cause disease. This process was mediated by the Argonaute proteins in which this protein was a key component of the RNA induced silencing complex (RISC). In this study, the program package GROMACS 4.0.3 was used to simulate the force fields ffamber99 for Argonaute proteins. These protein molecules were placed in octahedral box with periodic variation of the minimum distance of 1.6, 2.0, 2.4 nm which the box was then filled with SPC water molecules. The simulation was conducted at a temperature of 310 K and pressure 1 atm. Observations were made on the structural properties and dynamical properties of the protein. Structural properties would be represented by parameters such as Radius of Gyration, Solvent accessible surface, and the RMSD. Dynamical properties of these proteins were represented by the parameters of RMSF. Data processing shown there was no specific different between the three simulation.

*Key words:* Gene therapy, RISC, Protein, Protein Argonaute, Explicit solvent.

## KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa, karena atas berkat dan rahmatNya, penulisan skripsi yang berjudul “Simulasi Protein Argonaute dalam Pelarut Air Eksplisit” dapat terselesaikan. Penulisan skripsi ini dibuat untuk memenuhi salah satu syarat dalam mencapai gelar Sarjana Farmasi pada Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.

Keberhasilan penulisan skripsi ini tentu tidak terlepas dari bantuan dan dukungan baik secara moral, spiritual dan material dari berbagai pihak. Maka pada kesempatan ini, disampaikan ucapan terima kasih kepada:

1. Dr. phil. nat. Elisabeth Catherina W., S.Si., M.Si. selaku pembimbing yang telah banyak memberikan saran dan nasehat serta meluangkan waktu, tenaga dan pikirannya selama penulisan skripsi ini.
2. Lanny Hartanti, M.Si. dan Caroline, S.Si., M.Si., Apt. selaku dosen penguji yang telah banyak memberikan saran dan masukan untuk penyempurnaan skripsi ini.
3. Prof. Dr. J. S. Ami Soewandi selaku Rektor Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya, atas sarana dan prasarana yang telah disediakan.
4. Martha Ervina, S.Si., M.Si., Apt. selaku Dekan Fakultas Farmasi beserta segenap staf, laboran dan seluruh karyawan serta dosen pengajar Fakultas Farmasi yang telah banyak membantu, mengajar dan memberikan ilmu kepada saya selama 4 tahun masa studi.
5. Dra. Idajani Hadinoto, M.S., Apt. selaku wali studi yang telah membimbing dan memberi saran-saran serta nasehat yang sangat

berarti selama 4 tahun masa perkuliahan sebagai mahasiswa Fakultas Farmasi, Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.

6. Papi, Mami, Cahyadi, Aik yang, dan Mak Tabanan yang telah banyak memberikan bantuan moral, spiritual dan material dalam menyelesaikan pendidikan Strata-1 di Fakultas Farmasi, Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.
7. Teman-teman Farmasi Leo, Julanda, Siska, Widya, Nova, yang selalu memberikan dukungan dan bantuan selama penyusunan skripsi dan menuntut ilmu di Fakultas Farmasi Universitas Katolik Widya Mandala Surabaya.
8. Teman-teman mahasiswa dan semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu yang telah membantu kelancaran penulisan skripsi ini.

Akhir kata, sangat disadari bahwa penulisan skripsi ini masih jauh dari sempurna. Oleh karena itu, segala kritik dan saran yang membangun sangat diharapkan untuk penyempurnaan skripsi ini. Semoga skripsi ini dapat memberikan sumbangan yang bermanfaat bagi masyarakat pada umumnya dan bagi perkembangan ilmu kefarmasian pada khususnya.

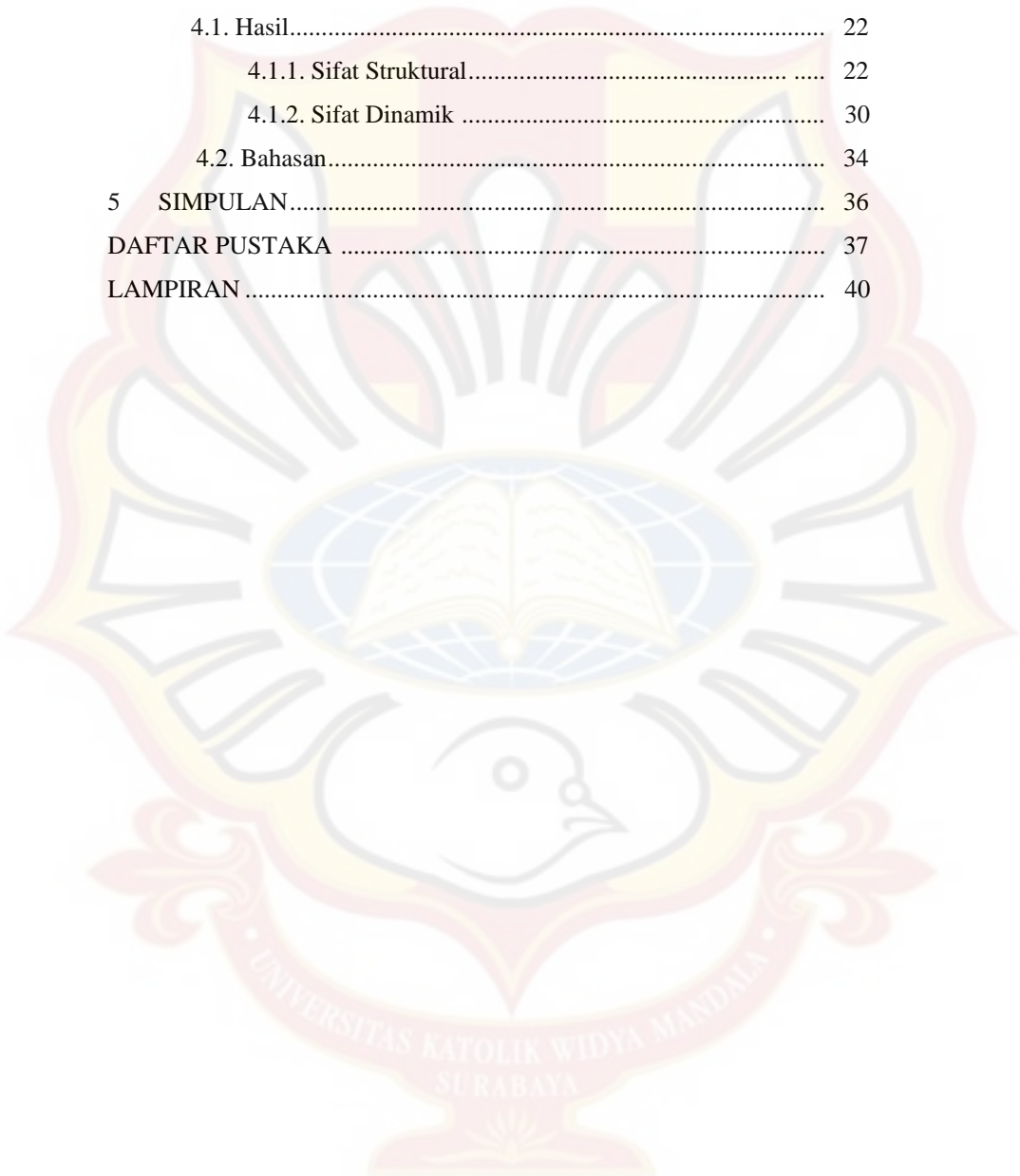
Surabaya, 4 Agustus 2010



## DAFTAR ISI

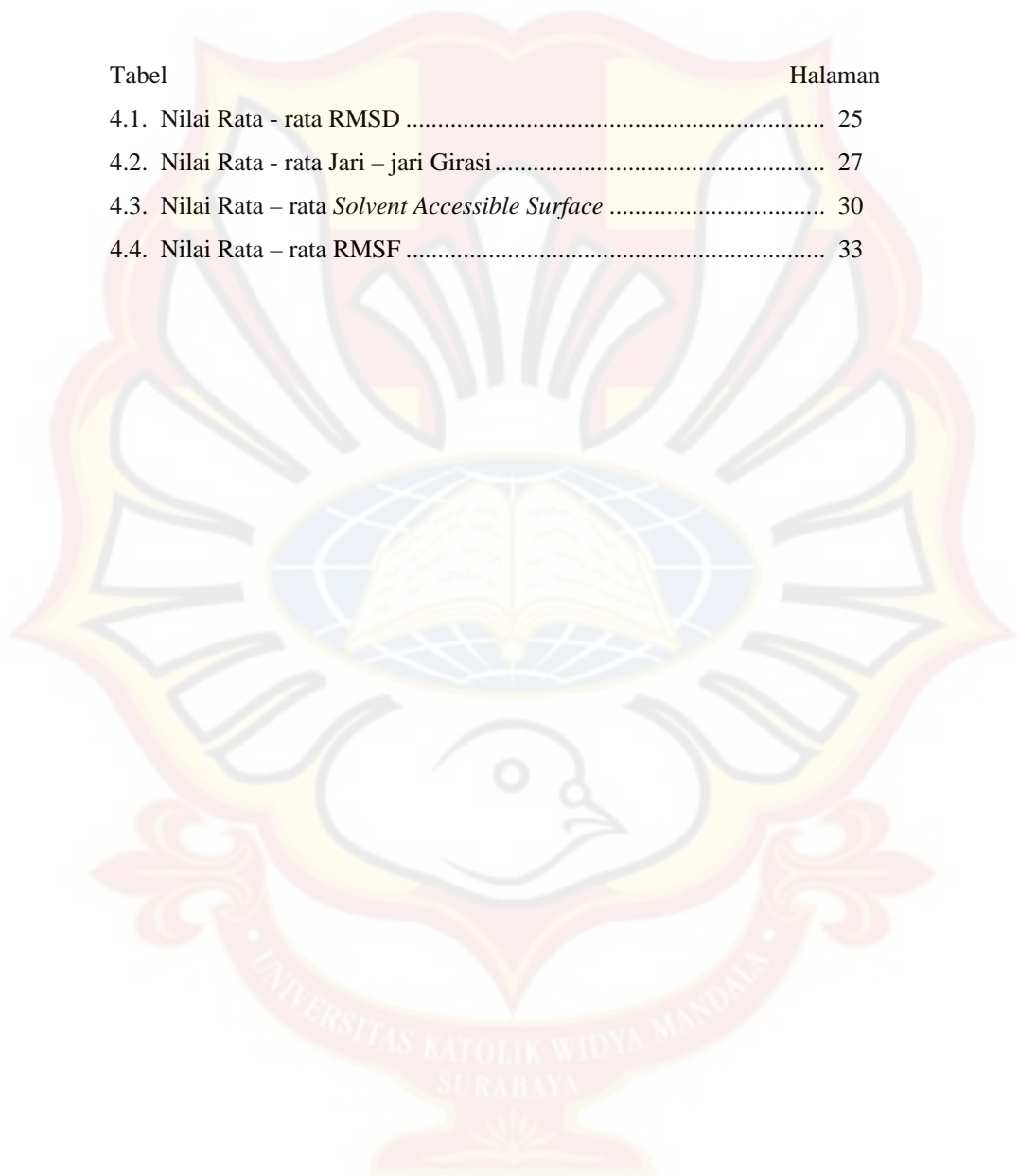
	Halaman
ABSTRAK .....	i
ABSTRACT .....	ii
KATA PENGANTAR .....	iii
DAFTAR ISI .....	v
DAFTAR TABEL .....	vii
DAFTAR GAMBAR .....	viii
DAFTAR LAMPIRAN .....	x
BAB	
1 PENDAHULUAN .....	1
2 TINJAUAN PUSTAKA .....	4
2.1. Tinjauan tentang siRNA.....	3
2.2. Tinjauan tentang Protein .....	4
2.2.1. Struktur protein.....	6
2.2.2. Protein Argonaute.....	11
2.3. Tinjauan tentang Sifat Struktural dan Sifat Dinamika.....	12
2.3.1. <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD).....	12
2.3.2. Jari – jari Girasi .....	13
2.3.3. <i>Solvent Accessible surface</i> .....	13
2.3.4. <i>Root Mean Square Fluctuation</i> (RMSF).....	14
2.4. Tinjauan tentang Simulasi Dinamika Molekul (MDS).....	14
2.4.1. Potensial Interaksi.....	15
2.4.2. Simulasi Dinamika Molekular Klasik.....	16
2.4.3. <i>Long Range Interactions</i> .....	17
3 METODE PENELITIAN .....	20
4 HASIL PERCOBAAN DAN BAHASAN .....	22

	Halaman
4.1. Hasil.....	22
4.1.1. Sifat Struktural.....	22
4.1.2. Sifat Dinamik .....	30
4.2. Bahasan.....	34
5 SIMPULAN.....	36
DAFTAR PUSTAKA .....	37
LAMPIRAN .....	40



## DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
4.1. Nilai Rata - rata RMSD .....	25
4.2. Nilai Rata - rata Jari – jari Girasi .....	27
4.3. Nilai Rata – rata <i>Solvent Accessible Surface</i> .....	30
4.4. Nilai Rata – rata RMSF .....	33



## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
1.1. Hasil sinar x dari struktur protein Argonaute .....	1
2.1. Lingkaran kehidupan RNA .....	4
2.2. Asam amino .....	5
2.3. Ikatan peptida (amida) pada protein .....	5
2.4. Struktur protein $\alpha$ -helix .....	6
2.5. Ikatan hidrogen .....	6
2.6. Struktur protein $\beta$ -sheet .....	7
2.7. Parameter-parameter ikatan dalam potensial interaksi .....	11
4.1. Grafik Waktu vs RMSD Protein Argonute dengan jarak antar molekul bayangan cermin periodik 1,6 nm .....	22
4.2. Grafik Waktu vs RMSD Protein Argonute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 1,6 nm terhadap struktur pada waktu 360 ps .....	23
4.3. Grafik waktu vs RMSD protein Argonaute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,0 nm .....	23
4.4. Grafik waktu vs RMSD protein Argonaute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,0 nm terhadap struktur pada waktu 130 ps .....	24
4.5. Grafik waktu vs RMSD Protein Argonute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,4 nm .....	24
4.6. Grafik waktu vs RMSD Protein Argonute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,4 nm terhadap struktur pada waktu 130 ps .....	25

Gambar	Halaman
4.7. Grafik waktu (ps) vs Jari-jari Girasi Protein Argonaute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 1,6 nm .....	26
4.8. Grafik waktu (ps) vs Jari-jari Girasi Protein Argonaute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,0 nm .....	26
4.9. Grafik waktu (ps) vs Jari-jari Girasi Protein Argonaute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,4 nm .....	27
4.10. Grafik waktu vs <i>Solvent Accessible surface</i> Protein Argonaute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 1,6 nm .....	28
4.11. Grafik waktu vs <i>Solvent Accessible surface</i> Protein Argonaut dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,0 nm .....	28
4.12. Grafik waktu vs <i>Solvent Accessible surface</i> Protein Argonaut dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,4 nm .....	29
4.13. Hasil superimpose .....	29
4.14. Grafik waktu vs RMSF protein Argonaute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 1,6 nm .....	31
4.15. Grafik waktu vs RMSF Protein Argonaute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,0 nm.....	31
4.16. Grafik waktu vs RMSF Protein Argonaute dengan jarak antar molekul bayangan cermin 2,4 nm .....	32

## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
A. GRAFIK WAKTU VS ENERGI.....	40
B. GRAFIK WAKTU VS SUHU .....	42
C. GRAFIK WAKTU VS TEKANAN.....	44
D.TABEL NILAI RATA-RATA ENERGI, TEKANAN, SUHU SELAMA SIMULASI 5000 PS .....	46

