

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian ini dapat disimpulkan bahwa:

Residu asam amino yang memiliki nilai RMSF paling tinggi yaitu P117, artinya residu tersebut memiliki fleksibilitas yang tinggi. Hal tersebut sesuai dengan grafik pada gambar 4. 2 dan struktur pada gambar 4. 3. Struktur P117 terletak pada bagian 13. Perubahan posisi atau daerah fleksibilitas dalam struktur terjadi pada bagian 13 dan 14. Hal ini mengkonfirmasi bahwa perubahan posisi atau daerah fleksibilitasnya terjadi bukan pada bagian sisi pengikatnya karena sisi pengikatnya relatif mempertahankan konformasinya. Oleh karena itu, hal ini tidak mempengaruhi sisi pengikatannya.

Di lain pihak, ligan ((s)-3-(3,4,5-trimetoksifenol)propil-1-benzilsulfonil)-piperidin-2-karboksilat tidak lagi berada pada lubang pengikatan meskipun tetap berinteraksi dengan Mip, tetapi ligan berpindah ke sisi heliks dan berinteraksi dengan residu F77, Q81, V82, I83, P84, A108, Y109, G110, P111, V114, G115 dan tidak lagi berinteraksi dengan residu pada sisi lembaran beta (Y55, F65, D66, F126).

5.2. Saran

Berdasarkan hasil yang diperoleh maka disarankan:

1. Menganalisis Afinitas antara protein Mip dengan ligan turunan asam pipemat ((S)-3-(3,4,5-trimetoksifenol)propil-1-(benzilsulfonil)piperidin-2-karboksilat).

DAFTAR PUSTAKA

- Altis, A., Nguyen, P.H., Hegger, R. and Stock, G. 2007, Dihedral Angle Principal Component Analysis of Molecular Dynamics Simulations, *The Journal of Chemical Physics*, **126(24)**: 244111-1–244111-10.
- Astuti, A.D., and Mutiara, A.B. 2009, *Performance Analysis on Molecular Dynamics Simulation of Protein Using GROMACS*, Department of Informatics Engineering, Jakarta.
- Bussi, G., Donadio, D. and Parrinello, M. 2008, Canonical Sampling through Velocity- Rescaling, *The Journal of Chemical Physics*, **126(1)**:014101-1– 014101-7.
- Ceymann, A., Horstmann, M., Ehses, P., Schweimer, K., Paschke, A.K. and Fischer, G. 2008, Solution Structure of The Legionella pneumophilla MIP-Rapamycin Complex, *BMC Strutural Biology*, **17(8)**:1-12
- Cunha, B.A., Burillo, A. and Bouza, E. 2015, Legionnaires Disease, *Lancet*, **387(10016)**: 376-385
- Hollingsworth, S.A. and Dror, R.O. 2019, Molecular Dynamics Simulation for All, *Neuron*, **99(6)**: 1129-1143.
- Juli, C., Sippel, M., Jager, J., Thiele, A., Weiwad, M., Schweimer, K., Rosch, P., Steinert, M., Sotriffer, C.A. and Holzgrabe, U. 2011, Pipecolic Acid Derivatives as Small- Molecule Inhibitors of The Legionella MIP Protein, *Journal of Medicinal Chemistry*, **54(1)**: 277–283.
- Leach, A.R. 2001, *Molecular modelling: principles and applications 2nd edition*, Pearson Education, England.
- Maiorov, V. N. and Crippen, G. M. 1995, Size-independent comparison of protein three- dimensional structures, *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, **22(3)**:273- 283.
- Mochario, L.H., 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.
- Ni Made, U., Lisa S., Liliek, S., H, 2017, Uji Potensi Antibakteri dan Antibiofilm Minyak Atsiri Umbi Teki (*Cyperus rotundus L.*) terhadap *Staphylococcus aureus* ATCC 6538, *Journal of Pharmacy*

Science and Practice, **10(1)**: 12-20

- Phin, N., Parry-Ford, F., Harrison, T., Stagg, H.R., Zhang, N., Kumar, K., Lortholary, O., Zumla, A. and Abubakar, I. 2014, Epidemiology and Clinical Management of Legionnaires Disease, *Lancet Infect Dis*, **14(10)**: 1011-1012.
- Rasch, J., Theuerkorn, M., Unal, C., Heinsohn, N., Tran, S., Fischer, G., Weiwad, M. and Steinert, M. 2015, Novel Cycloheximide Derivatives Targeting The Moonlighting Protein Mip Exhibit Specific Antimicrobial Activity Against *Legionella pneumophila*, *Bioengineering and Biotechnology*, **3(10)**: 1-8.
- Wu, W. and Owino, J. 2014, *Applying Periodic Boundary Conditions in Finite Element Analysis*, Simulia Community Conference, USA.
- Widjajakusuma, E., Frederica, M., Kaewono, K., Shea, A., De Sales, G., Kelan, Y.A., Indah, A., Annisavia, F., Simatupang, M.Y., Fildzahdina., 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 I*, **9(1)**:11-29.