

## Desain peningkatan termostabilitas Lipase B *Candida antarctica* dengan rekayasa penambahan ikatan disulfida pada enzim = Design of *Candida antarctica* Lipase B Thermostability improvement by introducing extra disulfide bond into the enzyme

Ahmad Randy, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20298049&lokasi=lokal>

---

### Abstrak

Lipase B *Candida antarctica* (CALB) secara ekstensif dipelajari dalam produksi biodiesel, produk farmasi, deterjen, dan senyawa lainnya secara enzimatik. Salah satu kekurangan penggunaan CALB adalah suhu optimumnya yang relatif rendah pada 40°C (313 K). Tujuan penelitian ini adalah untuk merancang mutan CALB yang lebih termostabil dibanding CALB wild type dengan rekayasa penambahan ikatan disulfida. Simulasi dinamika molekul dilakukan untuk mengamati proses unfolding atau denaturasi termal CALB. Denaturasi termal CALB dipercepat dengan melakukan simulasi pada suhu tinggi. Simulasi dinamika molekul CALB dilakukan dengan perangkat lunak GROMACS pada suhu 300-700 K. Prediksi pasangan residu yang dapat dimutasi menjadi sistein dilakukan dengan perangkat lunak ?Disulfide by DesignTM?. Pemilihan residu yang dimutasi, didasarkan pada hasil analisis fleksibilitas CALB.

Berdasarkan hasil analisis tersebut dirancang tiga mutan enzim CALB yaitu Mutan-1 (Leu73Cys/Ala151Cys), Mutan-2 (Trp155Cys/Glu294Cys), dan Mutan-3 (Thr43Cys/Ser67Cys). Parameter yang digunakan untuk membandingkan termostabilitas enzim mutan dengan wild type adalah RMSD, SASA (solvent accessible surface area), jari-jari girasi ( $R_g$ ), dan struktur sekunder. Simulasi dinamika molekul yang dilakukan pada ketiga mutan tersebut menunjukkan bahwa Mutan-1 memiliki termostabilitas yang lebih baik dibanding CALB wild type. Diharapkan hasil penelitian ini dapat memberikan saran rancangan mutasi yang dapat diimplementasikan ke dalam laboratorium basah (wet experiment).

.....*Candida antarctica* lipase B (CALB) is extensively studied in enzymatic production of biodiesel, pharmaceutical products, detergents, and other chemicals. One drawback of using CALB is its relatively low optimum temperature at 313 K (40°C). The objective of this research is to design CALB mutant with improved thermostability by introducing extra disulfide bond. Molecular dynamic simulation was conducted to get better insight on the process of thermal denaturation or unfolding in CALB. Thermal denaturation of CALB was accelerated by conducting simulation at high temperature. Molecular dynamic simulation of CALB was performed with GROMACS software package at 300-700 K. Prediction of possible mutation was conducted using ?Disulfide by DesignTM? software. Selection of mutated residues was based on flexibility analysis of CALB.

From those analyses, three mutants were designed, which are Mutant-1 (73LeuCys/151AlaCys), Mutant-2 (155TrpCys/294GluCys), and Mutant-3 (43ThrCys/67SerCys). Parameters that were used to compare the thermostability of mutant with wild type enzyme were RMSD, SASA (solvent accessible surface area), radius of gyration ( $R_g$ ), and secondary structure. Molecular dynamic simulation conducted on those three mutants showed that Mutant-1 have better thermostability compared to wild type CALB. The resulted mutant design will be used as a suggestion to engineer CALB mutant in wet experiment.