

Simulasi Pelipatan Protein Transforming Growth Factor Beta 3 (TGF-Beta 3) dalam Pembentukan Struktur Tiga Dimensi dengan Metode Dinamika Molekuler = Protein Folding Simulation of Transforming Growth Factor Beta 3 to Obtain Three-Dimension Structure with Molecular Dynamics Method

Farah Khalida Salsabila, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20494291&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Pelipatan protein merupakan hal penting dalam pembentukan struktur native protein dan fungsi biologisnya. Kesalahan pelipatan protein dapat menyebabkan penyakit seperti Alzhaimers dan fibrosis kistik. Struktur native protein Transforming growth factor b3 (TGF-b3) berbentuk dimer yang diperoleh dari hasil pelipatan monomer identik. Struktur native TGF-b3 dapat diperoleh dari rekombinan TGF-b3 dari E.coli dengan beberapa perlakuan kimia, namun proses ini cenderung membentuk badan inklusi yang mengandung protein non-aktif. Pada umumnya, protein yang terlipat dengan benar menjadi bentuk native merupakan protein yang aktif. Oleh karena itu diperlukan simulasi dinamika molekuler untuk mengetahui mampukah monomer protein TGF-b3 melakukan selffolding. Simulasi dinamika molekuler protein menggunakan perangkat Amber dilakukan pada rantai asam amino struktur monomer protein TGF-b3 dengan identitas PDB 1TGJ. Proses simulasi dilakukan selama 9 μs menggunakan parameter gabungan Amber forcefield ff14SBonlysc, GBNeck2, dan mbondi3 dalam sistem yang tidak menghitung interaksi atom dengan air. Hasil simulasi diperoleh struktur yang berbeda dari struktur monomer kristal protein pada PDB. Rata-rata RMSD dari perbandingan kedua struktur didapatkan kurang lebih 15-16 Å dengan RMSD terendah yakni 14,0479 Å. Dari simulasi dinamika molekuler yang dilakukan dengan pendekatan all atom dalam implisit solven, diperoleh struktur monomer non-native protein TGF-b3

<hr>

ABSTRACT

Protein folding has an important role in the formation of native structure and their biological functions. Incorrect folding can cause diseases such as Alzheimer's and cystic fibrosis. The structure of Transforming growth factor b3 (TGF-b3), in the form of dimers, obtained from folded monomer. Its native structure can be obtained from recombinant TGF-b3 from E. coli when given several chemical treatments, but prone to be misfolded therefore a molecular dynamics simulation is needed to determine whether self-folding of monomer TGF-b3 can be done. Molecular dynamics simulations of protein using Amber software were performed on amino acid chains of monomer TGF-b3 from PDB, the identity is 1TGJ. The simulation process is carried out for 9 μs using a combined parameter of Amber forcefield ff14SBonlysc, GBNeck2, and mbondi3 at an implicit water environment. Unfortunately, the structure obtained from the simulation was different from its monomer crystal structure. The average RMSD we got in the comparison between result structure and monomer crystal structures was approximately 15-16 Å with the lowest RMSD was 14,0479 Å. From the molecular dynamics simulation carried out with the approach of all atoms in implicit water, the non-native structure of monomer TGF-b3 protein was obtained.