

Simulasi dinamika molekuler transfersom sebagai vesikel lipid protein epidermal growth factor = Molecular dynamics simulation of transfersome as lipid vesicle for epidermal growth factor protein

Salshabilla Nur Susilawati, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20494375&lokasi=lokal>

Abstrak

Epidermal Growth Factor (EGF) adalah polipeptida yang memegang peranan penting dalam penyembuhan luka. Namun, EGF memiliki keterbatasan apabila diaplikasikan secara topikal yaitu tingkat permeasinya rendah sehingga vesikel lipid transfersom dipilih untuk membawa EGF karena memiliki karakteristik deformabilitas tinggi. Melalui simulasi dinamika molekuler akan didapatkan visualisasi pembentukan vesikel transfersom. Penelitian dilakukan untuk menemukan metode simulasi dinamika molekuler yang dapat menghasilkan berkas output sehingga visualisasi akhir vesikel lipid transfersom untuk protein EGF dapat diperoleh. Simulasi dilakukan dengan menggunakan program Amber. Sebelum simulasi dilakukan, protein EGF dan bahanbahan vesikel perlu dipersiapkan untuk menghasilkan berkas parameter dan topologi. Berkas-berkas ini digunakan selama proses simulasi dinamika molekuler yang diawali dengan tahap minimisasi, pemanasan pertama, pemanasan kedua, ekuilibrasi, dan diakhiri dengan tahap produksi. Hasil simulasi divisualisasikan dengan menggunakan Visual Molecular Dynamics (VMD). Selain itu juga, analisis dilakukan terhadap hasil simulasi diperoleh kestabilan simulasi terjadi pada saat 100 20 ns hingga 130 ns sehingga simulasi dapat dihentikan. Visualisasi yang didapatkan dari hasil simulasi ini tidak menunjukkan keberadaan protein EGF di dalam vesikel lipid tetapi hanya menempel di bagian luar vesikel lipid. Oleh karena itu, untuk penelitian berikutnya simulasi dinamika molekuler transfersom dapat dilakukan dengan ukuran kotak virtual yang lebih besar serta penambahan komponen pelarut (air) pada saat pengemasan kotak virtual.

<hr>

Epidermal Growth Factor (EGF) is a polypeptide that has an important role in the process of wound healing. However, EGF has a limitation if it is applied topically since it has a low permeation level so that lipid vesicle transfersome has been chosen to transport EGF since it has high level of deformability. Through molecular dynamics simulation the researcher will get visualization of transfersome formation process. The research is conducted to find the method for molecular dynamic simulation that can produce an output archive so that it can visualize the final lipid vesicle transfersome for protein EGF to be achieved. This simulation is done using the Amber programme. Before the simulation is conducted, the protein EGF and the ingredients for the vesicle are needed to be prepared for the parameter and the topology archives. The archives will be used throughout the molecular dynamic simulation process, which will be started with the minimization stage, the first Heating, the second Heating, equilibration, and end with the production stage. The result of the simulation will be visualized using Visual Molecular Dynamics (VMD). Furthermore, this analysis is brought towards the result that achieves the stabilization of the simulation that happens on 100 20 ns until 130 ns, meaning that the simulation can be stopped. The achieved visualization

from the simulation does not show the protein EGF to be inside of the lipid vesicle, and it only adheres to the outer layer of the lipid vesicle. Therefore, for the next research, molecular dynamic simulation for transfersome can be done using a bigger virtual box and an addition to the solvent matter (water) when the packaging of the virtual box occurs.