

INTISARI

6-hidroksi-1-metil1,2,3,4-tetrahidro- β -karbolin (6OHMTH β C) adalah senyawa turunan coklat yang memiliki potensi antidepresan. Senyawa ini dapat meningkatkan sekresi dopamin dan serotonin yang baik untuk peningkatan mood. Studi ini dilakukan dengan menggunakan simulasi docking molekuler (*in silico*). Desain penelitian adalah deskriptif eksploratif berbasis komputasi. Hasil docking molekuler menunjukkan bahwa skor energi terendah dan nilai RMSD backbone $<2\text{\AA}$. Prosedur *docking* dilakukan terhadap : (i) reseptor 6AWP tanpa ligan, (ii) dengan *native* ligan (6OHMTH β C), dan (iii) dengan ligan referensi (fluvoxamine). Penelitian ini juga melakukan simulasi docking molekuler 6OHMTH β C menuju 6AWP untuk menemukan senyawa pada receptor binding pocket. Pada penelitian ini juga dilakukan simulasi dinamika dan identifikasi determinan molekuler menggunakan software PyPLIF-HIPPOS dan YASARA Structure 20.1.24.10 dengan sistem operasi Windows 10. Hasil penelitian ini menunjukkan kestabilan simulasi dinamika pada kompleks protein transpor serotonin dengan ligan referensi 6OHMTH β C pada 50 ns, dan hasil ini ditentukan berdasarkan nilai RMSD dan Binding Energy (BE). Penentuan BE dihitung berdasarkan BE yang tersedia di YASARA dan Ubuntu. Nilai BE ligan asal adalah -11,6590 kJ/mol dan ligan pembanding adalah -83880 kJ/mol. Nilai RMSD ligan asal tertinggi adalah 1,39292 \AA sedangkan nilai RMSD ligan referensi adalah 1,71072 \AA . Asam amino esensial yang dibawa adalah 438SER dengan interaksi diperantarai oleh ikatan hidrogen. Hal ini menunjukkan bahwa 6OHMTH β C dapat dianggap sebagai kandidat antidepresan yang kompeten.

Kata kunci: 6AWP, 6OHMTH β C, 438SER

ABSTRACT

6-hydroxy-1-methyl-1,2,3,4-tetrahydro- β -carboline (6OHMTH β C) is a chocolate derivative that has antidepressant potency. It can increase dopamine and serotonin secretion which leads to mood improvement. This study was carried out using computational molecular docking simulations (in silico). The research design was computational-based exploratory descriptive. The results of molecular docking showed the lowest energy score and the backbone RMSD value $<2\text{\AA}$. The procedure performed was 6AWP receptor docking without ligand, with native ligand (6OHMTH β C), with reference ligand (fluvoxamine). This study also performed molecular docking simulations of 6OHMTH β C towards 6AWP to find compounds in the receptor binding pocket. This study also performed dynamics simulations and identified the molecular determinants using PyPLIF-HIPPOS and YASARA Structure software 20.1.24.10 with the Windows 10 operating system. This study succeeded in determining the stability of the dynamics simulation of the serotonin transport protein complex with the reference ligand 6OHMTH β C for 50 ns, and this result corresponds to the RMSD value and binding energy. The determination of binding energy (BE) was calculated from the BE calculation available at YASARA and Ubuntu. The binding energy value of the original ligand was -11.6590 kJ/mol and the reference ligand was -83880 kJ/mol. The highest RMSD value of the original ligand was 1.39292 \AA while the RMSD value of the reference ligand was 1.71072 \AA . The essential amino acid carried out was 438SER with hydrogen bond interactions so 6OHMTH β C was considered a competent antidepressant candidate.

Keyword: 6AWP, 6OHMTH β C, 438SER