

**PEMODELAN STRUKTUR 3-DIMENSI ENZIM β -XILOSIDASE
(D121N DAN D139N) DENGAN METODE
HOMOLOGI DAN *THREADING* SERTA *DOCKING*
MENGUNAKAN SUBSTRAT *p*-NITROPHENYL-XYLOPIRANOSIDE
ILMA AMALINA**

Prof. Dr. Ni Nyoman Tri Puspaningsih
KKC KK MPK 37 11 Ama p

ABSTRAK

Pengaruh mutasi terhadap struktur 3D enzim dapat diketahui secara *in silico* melalui pemodelan struktur 3D enzim. Penelitian ini bertujuan memodelkan struktur 3-dimensi dari enzim β -xilosidase IT-08 dan mutan (D121N dan D139N), sehingga dapat diketahui pengaruh mutasi terhadap struktur 3D dan kompleks enzim-substrat *p*-NP-X melalui *docking*. Pemodelan yang dilakukan menggunakan metode homologi dan *threading* dan dipilih model terbaik, yaitu menggunakan metode homologi dengan *multiple template*. Cetakan 1YRZ dan 2EXH digunakan untuk pemodelan enzim β -xilosidase IT-08 dan mutan (D121N dan D139N) menggunakan *Easy Modeller*. Kualitas model dievaluasi menggunakan *PROCHECK* melalui plot Ramachandran. Pada pemodelan ini dapat diketahui pengaruh mutasi D121N dan D139N terhadap struktur enzim β -xilosidase IT-08 yang dilakukan melalui *superimpose* menggunakan *SUPERPOSE* yang dianalisis menggunakan *PyMol*. Kompleks enzim-substrat juga dapat diketahui dengan *docking* menggunakan *Autodock4* dan *Autodock vina* yang masing-masing dianalisis menggunakan *Autodock tools* dan *PyMol*. Hasil mode terbaik menggunakan cetakan 2EXH dan 1YRZ untuk pemodelan enzim β -xilosidase IT-08 dan mutan (D121N dan D139N). Hasil *superimpose* menunjukkan adanya perubahan struktur 3D melalui nilai RMSD. Hasil *docking* menunjukkan model kompleks enzim-substrat *p*-NP-X, energi bebas pengikatan, interaksi ikatan hydrogen dan interaksi Van Der Waals-elektrostatik.

Kata Kunci: pemodelan struktur protein, homologi, threading, docking, β -Xilosidase

ABSTRACT

Mutation effect of 3D structure can be recognizes by in silico with modeling of 3D enzyme structure. The purpose of this research is modeling 3-dimension (3D) structure of β -xylosidase IT-08 enzyme and mutant (D121N and D139N), so the effect of mutation in 3D structure and complex enzyme-substrate p-NP-X with docking. Homology and threading methods are used and the best model selected from homology methods with multiple templates. Templates 1YRZ and 2EXH are used for modeling 3D structure of β -xylosidase IT-08 enzyme and mutant (D121N and D139N) with Easy Modeller. PROCHECK by Ramachandran plot is used to evaluation model. Superimpose from SUPERPOSE is used to show the effect of mutation D121N and D139N to 3D structure of β -xylosidase IT-08 enzyme and analyzed with PyMol. Enzyme-substrate complex is showing with docking by Autodock4 and Autodock vina which analyzed by Autodock tools and PyMol. The best model gain with 2EXH and 1YRZ templates for modeling 3D structure β -xylosidase IT-08 enzyme and mutant (D121N and D139N). Superimpose indicate the changing of 3D structure from RMSD value. Docking are showing the enzyme-substrate p-NP-X complex, free energy, hydrogen bond interaction, and Van Der Waals-electrostatic interaction.

Key words: structure protein modeling, homology, threading, docking, β -xylosidase