

ABSTRAK

Penyakit gagal ginjal kronis merupakan penyebab kematian tertinggi ke-9 menurut WHO. Sebagian besar pasien menjalani hemodialisis sebagai terapi medis pengganti ginjal. Aspek penting dalam efektivitas hemodialisis adalah biokompatibilitas membran dialisis dalam hal interaksi membran tersebut dengan protein plasma darah. Sebagian besar protein plasma darah adalah HSA yang memiliki kemampuan adsorpsi terhadap permukaan sintesis, termasuk membran dialisis. Hal ini dapat mengubah struktur konformasi dan fungsi HSA dalam darah. Polimer PES umum digunakan sebagai bahan membran dialisis karena memiliki kekuatan mekanik yang tinggi namun bersifat hidrofobik sehingga sangat rentan terhadap adsorpsi protein. Polimer PVP jarang digunakan namun bersifat hidrofilik yang diprediksikan akan mampu mencegah terjadinya adsorpsi protein HSA. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan pengaruh jarak interaksi dan energi interaksi terhadap kompleks HSA...PES dan HSA...PVP, menentukan kestabilan kompleks selama 50 ns.

Protein HSA digunakan sebagai reseptor dan polimer PES 10 serta polimer PVP 15 monomer sebagai ligan. Interaksi kompleks HSA...PES dan HSA...PVP dihitung secara *in silico* menggunakan metode mekanika molekuler dan melalui dua tahap yakni *molecular docking* dan MD menggunakan perangkat lunak YASARA selama 50 ns. Data perhitungan yang dihasilkan berupa nilai energi interaksi, jarak interaksi, total energi potensial, RMSD, Rg, energi bebas ikatan (ΔG_{bind}) dan perubahan interaksi reseptor-ligan selama simulasi.

Energi interaksi kompleks HSA...PES sebesar -39,02 kJ/mol membentuk 12 ikatan hidrogen (2,10–4,07 Å) dan 17 interaksi hidrofobik (4,25–5,55 Å), sedangkan energi interaksi kompleks HSA...PVP sebesar -38,97 kJ/mol membentuk 6 ikatan hidrogen (2,19–3,98 Å) dan 7 interaksi hidrofobik (4,15–5,09 Å). Kompleks HSA...PES membentuk lebih banyak interaksi daripada kompleks HSA...PVP sehingga memungkinkan terjadinya perubahan struktur konformasi protein HSA yang menyebabkan gangguan pada fungsi HSA. Kompleks HSA...PES memiliki total energi potensial sebesar $-298,64 \times 10^4$ kJ/mol, nilai RMSD sebesar 5,66 Å dan Rg sebesar 3,56 Å. Kompleks HSA...PVP memiliki total energi potensial sebesar $-299,43 \times 10^4$ kJ/mol, nilai RMSD sebesar 3,95 Å dan Rg sebesar 3,55 Å. Kompleks HSA...PVP lebih stabil secara keseluruhan karena memiliki nilai total energi potensial, RMSD dan Rg yang lebih rendah daripada kompleks HSA...PES. Data perubahan sudut dihedral pada struktur sekunder masing-masing kompleks, PVP lebih mampu untuk menjaga kestabilan struktur sekunder protein HSA.

Kata kunci: Hemodialisis, HSA, PES, PVP, MD, *molecular docking*