

Analisa kestabilan membran Tetraether Lipid (TEL) dari Arkaea *Thermoplasma acidophilum* berdasarkan pengaruh cincin Siklopentana terhadap temperatur dan pH ekstrim dengan simulasi dinamika molekuler = Analysis of thermoplasma acidophilum Tetraether Lipid (TEL) membrane stability under cycl opentane rings influence againts extreme temperature and pH using molecular dynamics simulation

Zessinda Luthfa, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20332197&lokasi=lokal>

---

Abstrak

*Thermoplasma acidophilum* adalah jenis arkaea yang mampu beradaptasi di lingkungan ekstrim, yaitu pH 1- 4 dan temperatur antara 39oC dan 59oC (Freisleben et al., 1994). Karena organisme ini tidak memiliki dinding sel, maka membran sel ini harus tahan dan stabil untuk melindungi sitoplasma terhadap pengaruh lingkungan. Cincin siklopentana dan eter berkontribusi sebagai stabilitas struktural tetraether lipid (TEL) dalam konstituen membran.

Pada studi ini, membran TEL yang berdimensi 4x1x1 Å dimodelkan dengan menggunakan model pelarut implisit GBSW. Selain itu diberikan pengaruh temperatur (312 dan 332 K), pH (1 dan 4), dan jumlah cincin siklopentana (no 1, tiga, dan lima NCC dilambangkan, TCC, LCC, masing- masing) yang kemudian disimulasikan se lama 100 ps.

Hasilnya, dianalisis berdasarkan pada struktur, energi interaksi, dan RMSD dari se luruh atom di dalamnya. Berdasarkan ketiga variasi yang digunakan, maka membran dengan kandungan cincin s iklopentana disimulasikan dengan empat keadaan: keadaan A (pH 4;T=312K), B (pH 4;T=332K), C (pH 1,5;T=312K), dan D (pH 1,5;T=332K). Jarak antara gugus kepala (bagian hidrofobik) merupakan ketebalan dari struktur membran, berada pada 21- 23Å (konsisten dengan Stern et al., 1992) dengan nilai terpanjang dimiliki oleh membrane NCC dan terpendek LCC. Sedangkan berdasarkan perhitungan energi interaksi, energi ikatan terendah dan RMSD dari se luruh atom paling kecil dimiliki oleh membran LCC di keadaan D (81,03 kkal/mol dan 8,13 Å). Nilai tersebut sesuai dengan kondisi kultur pertumbuhannya (pH 1,5 dan 59oC) dan beberapa hasil eksperimen (Ernst et al., 1998, Shimada et al., 2008, dan Nicolas, 2005) yang menunjukkan bahwa secara biologis dan model membran TEL stabil dalam kondisi ekstrim dengan temperatur tinggi dan pH rendah.

<hr>

*Thermoplasma acidophilum* is an archaeon able to grow in extreme conditions of pH 1- 4 and temperatures between 39 and 59oC (Freisleben et al., 1994). Since the organism lacks a cell wall, the cell membrane must be resistant and stable to protect the cytoplasm from life- threatening environmental influences. Pentacycles and ether bonds contribute to the structural stability of tetraether lipids (TEL) as membrane constituents.

In this work, molecular dynamic simulations of TEL membrane with 4x1x1 dimension is used as an implicit solvent GBSW model .The influence of temperature (312 and 332 K), pH (1 and 4), and the number of pentacycles ( none, three, and five denoted NCC, TCC, LCC, respectively ) is simulated at 100 ps.

Analysis is based on the structure, interaction energy, and RMSD of all atoms and with these three variations, a model with four membrane states is established for each number of pentacycles: State A (pH 4; T =312K), state B (pH 4 ;T =332K), state C (pH 1.5;T =312K), and state D (pH 1.5 ; T =332K). The distance between the polar head groups denoting the thickness of the hydrophobic membrane moiety of all different structures is obtained between 21-23Å (consistent with Stern et al., 1992). NCC exerts the longest and LCC the shortest distance. Based on interaction energy calculations, the lowest bond energy and RMSD of all atoms is obtained for LCC at state D (81.03 kcal/mol and 8.13 Å).

This result is consistent with culture growth conditions at pH 1.5 and 59oC and experimental studies, which show the stability of biological and model TEL membranes in extreme conditions of high temperature and low pH (Ernst et al., 1998, Shimada et al., 2008, and Nicolas, 2005).