

Simulasi dinamika molekul liposom dengan kafein sebagai model obat = Molecular dynamics simulation of liposome and caffeine for designing of drug

Wike Widasari, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20493889&lokasi=lokal>

Abstrak

Liposom adalah teknologi pengiriman obat untuk meningkatkan kemanjuran dan keamanan obat. Liposom adalah vesikel amphiphilic yang memiliki bagian kutub dan non-kutub. Ini memungkinkan liposom untuk membawa obat-obatan hidrofilik dan hidrofobik. Kafein adalah zat psikoaktif yang disebut xanthine alkaloid yang memiliki sifat penetrasi kulit yang buruk. Ini karena kafein memiliki sifat hidrofilik. Jadi untuk meningkatkan konsentrasi kafein di lapisan kulit yang lebih dalam, diperlukan vesikel seperti liposom. Proses pembuatan liposom konvensional membutuhkan waktu lama, rumit dan dapat menghasilkan racun dari residu pelarut organik yang digunakan. Simulasi dinamika molekul dapat mengatasi keterbatasan pembuatan liposom konvensional dengan memvisualisasikan ikatan molekul dan menganalisis sifat-sifat liposom berdasarkan interaksi antar ikatan. Molekul kafein akan dikombinasikan dengan molekul kolesterol dan fosfolipid DPPC (1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine). Simulasi dinamika molekul dilakukan pada Kafein dan liposom dengan komposisi Kolesterol - DPPC (1: 1; 1: 2; 1: 4) yang dipanaskan oleh 323 K dalam kotak virtual 100 Å dan diproduksi pada 125 ns. Sistem akan diproses menggunakan kuning. Visualisasi menghasilkan ikatan antar molekul untuk membentuk koleksi padat, ikatan tidak sempurna antar molekul dalam bentuk bola berlubang. Ini karena keterbatasan komputer dan kebutuhan untuk pelarut yang cocok. Sedangkan hasil analisis yang diperoleh dari ketiga liposom di atas stabil pada 323 K dan Kolesterol-DPPC (1: 4) memiliki ikatan paling padat dan volume terkecil adalah 44,7 Å X 43,4 Å X 58,8 Å (X, Y, Z). Energi potensial dari ketiga liposom akan berkurang yang menunjukkan keseimbangan energi di semua liposom.

<hr>

Liposomes are a drug delivery technology to improve the efficacy and safety of drugs. Liposomes are amphiphilic vesicles that have polar and non-polar sections. This allows the liposome to carry hydrophilic and hydrophobic drugs. Caffeine is a psychoactive substance called xanthine alkaloid which has poor skin penetration properties. This is because caffeine has hydrophilic properties. So to increase the concentration of caffeine in the deeper layers of the skin, vesicles such as liposomes are needed. The process of making conventional liposomes takes a long time, is complicated and can produce toxins from the residues of organic solvents used. Molecular dynamics simulations can overcome the limitations of making conventional liposomes by visualizing molecular bonds and analyzing the properties of liposomes based on interactions between bonds. Caffeine molecules will be combined with cholesterol molecules and DPPC phospholipids (1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine). Molecular dynamics simulations were carried out on Caffeine and liposomes with Cholesterol-DPPC composition (1: 1; 1: 2; 1: 4) heated by 323 K in a 100 Å virtual box and produced at 125 ns. The system will be processed using yellow. Visualization produces bonds between molecules to form solid collections, imperfect bonds between molecules in the shape of a hollow ball. This is due to computer limitations and the need for suitable solvents. While the analysis results obtained from the three liposomes above are stable at 323 K and Cholesterol - DPPC (1: 4)

has the densest bond and the smallest volume is $44.7 \text{ \AA} \times 43.4 \text{ \AA} \times 58.8 \text{ \AA}$ (X, Y, Z). The potential energy of all three liposomes will decrease which shows the energy balance in all liposomes.