

Simulasi dinamika molekuler Solid Lipid Nanoparticle (SLN) sebagai vesikel pembawa TGF-beta 3 untuk osteoarthritis = Molecular dynamic simulation of solid lipid nanoparticle (SLN) as TGF-beta 3 carrier vesicle for osteoarthritis

Maulana Nurhadi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20494197&lokasi=lokal>

Abstrak

Osteoarthritis (OA) adalah penyakit degeneratif yang ditemukan pada orang usia lanjut. Seiring bertambahnya usia, kemungkinan menderita penyakit OA meningkat. Senyawa IL-1 β ditemukan dalam jumlah tinggi pada pasien dengan OA dan diketahui meningkatkan aktivitas enzim yang merosot jaringan tulang rawan. TGF- β 3 diprediksi sebagai penginduksi kuat dari sintesis matriks ekstraseluler (ECM) dan memainkan peran penting sebagai agen penghambat untuk IL-1 β . Dalam penelitian ini proses simulasi dinamika molekul dengan program Amber dilakukan dengan mengacu pada langkah-langkah kerja yang dilakukan oleh Chris Lim & David A. Case dan Benjamin D. Madej & Ross C. Walker. Dalam proses simulasi dinamika molekuler bertujuan untuk membuat vesikel Solid Lipid Nanoparticle (SLN) yang tersusun dari minyak zaitun (fase minyak) dan tristearin (fase lemak) yang mengandung senyawa (protein) TGF- β 3. Hasil dari proses simulasi menunjukkan bahwa nilai total perubahan total energi berkurang (nilai rata-rata 0 - 20 ns adalah 37,105,0541 kkal / mol dan pada waktu simulasi 100-120 ns adalah 36,570.2858 kkal / mol) dan Pengurangan grafik energi total tidak terlalu curam dalam periode 100 - 120 ns yang menunjukkan bahwa kondisi sistem cukup stabil. Kepadatan rata-rata meningkat (pada waktu simulasi 0 - 20 ns pada 0,9943 cm³ / mol dan pada 100 - 120 ns pada 1.0001 cm³ / mol). Nilai rata-rata volume sistem menurun (pada waktu simulasi 0 - 20 ns pada 309.902.5324 Å³ dan pada waktu simulasi 100 ns - 120 ns pada 308.116.6341 Å³). Data kepadatan dan volume interpretasi sistem dari hasil simulasi, karena nilai kepadatan berbanding terbalik dengan nilai volume sistem, sejalan dengan rumus untuk mendapatkan nilai kerapatan suatu objek. Nilai suhu sistem cukup stabil dari awal hingga akhir simulasi, yang berkisar dari 303 ° K (30 ° C). Dengan memperoleh hasil ini, para peneliti telah berhasil melakukan proses simulasi dinamika molekul untuk membuat vesikel SLN yang mengandung TGF- β 3 bersama dengan rincian komponen pendukung simulasi.

<hr>

Osteoarthritis (OA) is a degenerative disease found in elderly people. As we get older, the chance of suffering from OA increases. IL-1 β compounds are found in high amounts in patients with OA and are known to increase the activity of enzymes that degenerate cartilage tissue. TGF- β 3 is predicted as a strong induction of extracellular matrix (ECM) synthesis and plays an important role as an inhibiting agent for IL-1 β . In this research the molecular dynamics simulation process with the Amber program is carried out with reference to the work steps carried out by Chris Lim & David A. Case and Benjamin D. Madej & Ross C. Walker. In the molecular dynamics simulation process aims to make Solid Lipid Nanoparticle (SLN) vesicles composed of olive oil (oil phase) and tristearin (fat phase) containing TGF- β 3 (protein) compounds. The results of the simulation process show that the total value of total energy change is reduced (the average value of 0-20 ns is 37.105.0541 kcal / mol and at the time of simulation 100-120 ns is 36.570.2858 kcal / mol) and the reduction in the total energy graph is not too steep in the period

100-120 ns which indicates that the system condition is quite stable. Average density increases (at simulation time 0 - 20 ns at 0.9943 cm³ / mol and at 100-120 ns at 1.0001 cm³ / mol). The average value of the system volume decreases (at simulation time 0 - 20 ns at 309,902.5324 Å³ and at simulation time 100 ns - 120 ns at 308,116,6341 Å³). Data density and system interpretation volume from the simulation results, because the density value is inversely proportional to the system volume value, in line with the formula to get the density value of an object. The system temperature value is quite stable from the beginning to the end of the simulation, which ranges from 303 ° K (30 ° C). By obtaining these results, the researchers have succeeded in carrying out a molecular dynamics simulation process to make SLN vesicles containing TGF- β together with details of the supporting components of the simulation.