

## ABSTRAK

### EFEK PENAMBATAN SENYAWA DEMETOKSIKURKUMIN DAN BISDEMETOKSIKURKUMIN TERHADAP PROTEIN LSD1

*Nadia Sayyidah Aulia<sup>1</sup>, M. Salman Fareza<sup>2</sup>, Triyadi Hendra Wijaya<sup>2</sup>*

**Latar Belakang:**  $\beta$ -talasemia merupakan penyakit genetik pada sintesis hemoglobin di dalam sel darah merah yang ditandai dengan menurunnya produksi  $\beta$ -globin. Senyawa kurkumin diketahui dapat meningkatkan kadar HbF pada sel K562. Senyawa demetoksikurkumin dan bisdemetoksikurkumin diketahui memiliki stabilitas dan bioavailabilitas yang lebih baik dari kurkumin. Penelitian ini bertujuan untuk melihat interaksi senyawa demetoksikurkumin dan bisdemetoksikurkumin pada protein LSD1 secara *in silico*.

**Metodologi:** Penelitian ini merupakan penelitian eksperimental yang dilakukan dalam dua tahap. Pertama, validasi metode yang meliputi pengunduhan struktur LSD1 (PDB ID: 6KGP), preparasi struktur protein dengan menghilangkan molekul air dan memisahkan molekul protein dan ligan natif, penambatan kembali dengan Ligan natif menggunakan AutoDock Vina dan penghitungan nilai RMSD. Kedua, penambatan molekuler senyawa demetoksikurkumin dan bisdemetoksikurkumin dengan protein LSD1 menggunakan koordinat hasil validasi yang valid dan visualisasi penambatan dengan menggunakan BIOVIA Discovery Studio 2020.

**Hasil Penelitian:** Validasi menunjukkan nilai RMSD yaitu 1,402 Å. Diperoleh energi ikatan terendah untuk protein LSD1 yaitu -10,4 kkal/mol untuk senyawa demetoksikurkumin dan -10,2 kkal/mol untuk senyawa bisdemetoksikurkumin. Residu asam amino pada LSD1 yang berperan pada pengikatan senyawa uji demetoksikurkumin yaitu Thr624; Val288 dan Arg316. Residu asam amino pada LSD1 yang berperan pada pengikatan senyawa uji demetoksikurkumin yaitu Thr624; Leu659; Val811; Arg316; Leu625; Tyr761 dan Trp751.

**Kesimpulan:** Senyawa demetoksikurkumin menunjukkan hasil yang lebih baik dan interaksi yang lebih potensial pada protein LSD1 dibandingkan bisdemetoksikurkumin.

**Kata Kunci:** beta talasemia, LSD1, kurkuminoid, penambatan molekul

---

<sup>1</sup> Mahasiswa Jurusan Farmasi Fakultas Ilmu-Ilmu Kesehatan Universitas Jenderal Soedirman

<sup>2</sup> Departemen Farmasi Fakultas Ilmu-Ilmu Kesehatan Universitas Jenderal Soedirman

## ABSTRACT

### MOLECULAR DOCKING OF DEMETHOXYCURCUMIN AND BISDEMETHOXYCURCUMIN ON LSD1

*Nadia Sayyidah Aulia<sup>1</sup>, M. Salman Fareza<sup>2</sup>, Triyadi Hendra Wijaya<sup>2</sup>*

**Background:**  $\beta$ -thalassemia, a hereditary genetic condition, that affects the synapse of hemoglobin in the red blood cell is characterized by low of beta-globin chain production. Curcumin are known to induce HbF levels in K562 cells. Compared to curcumin, demethoxycurcumin and bisdemethoxycurcumin are reported to exhibited much better chemical stability and solubility. In this study, an in silico approach will be examined to predict the interactions of these derivatives with LSD1 protein.

**Methods:** This study is an experimental research which conducted in two steps. First is a validation method which include downloading the LSD1 structure (PDB ID: 6KGP), preparing protein structures by removing water molecules and separate the protein molecules from native ligands. Further, the protein was docked with native ligand using AutoDock Vina and calculating the RMSD value. The second step is to perform a molecular docking of demethoxycurcumin and bisdemethoxycurcumin compounds with LSD1 protein using AutoDock Vina, these structures was docked with coordinates of the validation results. Docking visualization is performed using BIOVIA Discovery Studio 2020.

**Result:** RMSD value showed 1,402 Å on LSD1 protein. The lowest binding affinity of LSD1 was -10,4 kkal/mol for demethoxycurcumin and -10,2 kkal/mol for bisdemethoxycurcumin. Residues that important on LSD1 interaction with demethoxycurcumin are Thr624; Val288 and Arg316. Residues that important on LSD1 interaction with bisdemethoxycurcumin are Thr624; Leu659; Val811; Arg316; Leu625; Tyr761 and Trp751.

**Conclusion:** Demethoxycurcumin showed the best result and have more potential interaction than bisdemethoxycurcumin on LSD1.

**Keywords:** beta thalassemia, LSD1, Curcuminoid, molecular docking.

---

<sup>1</sup> Student of Department of Pharmacy, Faculty of Health Sciences, Jenderal Soedirman University

<sup>2</sup> Department of Pharmacy, Faculty of Health Sciences, Jenderal Soedirman University