

DINAMIKA SOLITON PADA RANTAI PROTEIN ALPHA HELIKS BERDASARKAN ANSATZ II MODEL DAVYDOV

Faozan Ahmad ^{1*}, Zuliyatin ², Husin Alatas ³

Bagian Fisika Teori, Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam,
Institut Pertanian Bogor, Bogor^{1*,2,3}
faozan@ipb.ac.id

ABSTRAK

Pemahaman terhadap mekanisme transfer dan penyimpanan energy pada makromolekul biologi sangat penting, untuk mengetahui sifat dan cara kerjanya. Pada penelitian ini, telah ditinjau pengaruh variasi kopling eksiton-fonon dan kopling dipol-dipol antar amida I (CO) terhadap dinamika soliton pada protein berdasarkan model Davydov. Dari hasil kajian disimpulkan bahwa kopling eksiton-fonon menentukan derajat nonlinieritas yang akan menentukan apakah transfer energy bersifat solitonik atau dispersif, sedangkan kopling dipol-dipol menentukan kelajuan gelombang soliton pada rantai protein.

Katakunci: soliton davydov, dinamika protein

1 PENDAHULUAN

Mekanisme kerja dari makromolekul biologi senantiasa melibatkan proses transfer dan penyimpanan bioenergi yang dihasilkan dari proses hidrolisis ATP (Adenosine Triphosphate), seperti halnya pada kontraksi otot, transport aktif, *protein folding* dan *DNA repair*. Namun hingga kini pengetahuan terhadap mekanisme proses masih belum begitu jelas, ada beberapa model yang sudah diusulkan untuk menjelaskan proses tersebut, salah satunya adalah Model Davydov. Saat ini kajian terhadap model transfer energi pada struktur molekuler juga dapat menjadi dasar bagi tantangan teknologi ke depan yaitu fononika dan nanoteknologi, dimana teknologi dituntut untuk mampu membuat piranti molekuler yang mampu mentransfer informasi dalam skala nano.

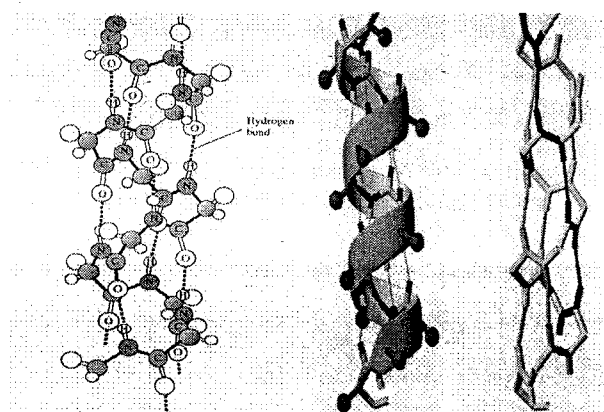
Davydov mengusulkan suatu model yang berusaha menjelaskan mekanisme transfer dan penyimpanan bioenergi pada protein. Model yang diajukan oleh Davydov ini menggunakan pendekatan teori zat padat yaitu konsep eksiton yang sebelumnya diusulkan oleh Frankel dan Landau [1]. Pada model ini Davydov mengklaim bahwa transfer energi pada protein bersifat solitonik. Bioenergi yang dihasilkan dari hidrolisis ATP disimpan sebagai energi vibrasi peregangan ikatan kovalen C=O. Eksperimen secara langsung untuk membuktikan kebenaran teori ini masih sulit terkait dengan kompleksitas struktur protein,

struktur yang tidak benar-benar periodik, dan tidak membentuk kristal tunggal. Tetapi walaupun demikian eksperimen pada kristal sederhana *acetanilida* memberikan hasil yang mendukung model teori Davydov [1,2,3,6].

Pada penelitian ini, akan ditinjau pengaruh variasi kopling eksiton-fonon dan kopling dipol-dipol antar amida I (vibrasi CO) terhadap dinamika soliton pada protein berdasarkan model Davydov.

2 MODEL DAVYDOV

Struktur α -Heliks merupakan konformasi polipeptida yang paling stabil. Struktur α -heliks terbentuk akibat adanya tiga ikatan hidrogen antar grup peptida sehingga tampak bahwa struktur α -heliks memiliki 3 kanal (*chain*) seperti ditunjukkan pada Gambar 1. Struktur α -Heliks bersifat right-handed, berputar berlawanan arah jarum jam dan dalam satu putaran penuh terdapat 3.6 asam amino. Energi yang dibutuhkan untuk pembentukan satu ikatan hidrogen antar peptida dalam orde 0.21 eV. Nitrogen peptida bekerja sebagai donor hidrogen, dan oksigen karbonil sebagai akseptor hidrogen. Ikatan hidrogen ini memiliki jarak optimal sebesar 4.5Å [1,5].



Gambar 1 Struktur protein α -heliks.

Protein dapat dipandang sebagai bio-mesin yang mampu mengkonversi energi kimia menjadi energi mekanik. Hal yang menarik dari protein yang hingga saat ini masih menjadi *open problem* adalah kemampuan protein dalam menyimpan dan mentransmisikan energi dalam kuantum kecil secara efisien. Salah satu model yang berusaha untuk menjelaskan

mekanisme transfer dan penyimpanan energi pada makromolekul biologi adalah model Davydov yang diusulkan oleh A.S. Davydov.

Dalam model Davydov bioenergi dalam protein disimpan sebagai energi vibrasi dari mode amida-I (peregangan C=O). Ide ini berangkat dari kenyataan bahwa energi yang dihasilkan dari hidrolisis ATP yaitu sekitar 0.42 eV adalah dua kali kuanta energi vibrasi C=O, dimana satu kuanta vibrasi C=O berenergi sebesar 0.205 eV. Mode vibrasi amida-I terkopling dengan kisi fonon. Interaksi vibrasi internal C=O, osilator frekuensi tinggi (eksiton), dengan vibrasi kisi, osilator frekuensi rendah (fonon), melalui kopling nonlinear mengakibatkan energi vibrasi amida-I dapat terlokalisasi pada struktur heliks dan terjaga dari dispersi, fenomena ini biasa disebut dengan istilah *self-localization* atau *self-trapping*. Dengan demikian pada kondisi tersebut eksiton dapat dipandang sebagai soliton yang merambat sepanjang rantai molekul dengan tetap menjaga bentuk, energi dan momentumnya [1,2,3,6].

2.1 Hamiltonian Sistem

Operator Hamiltonian model Davydov terdiri atas tiga komponen yaitu Operator Hamiltonian eksiton, fonon dan interaksi eksiton-fonon [1,2,3,6], sebagai berikut:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{int}. \quad (1)$$

Operator energi eksiton didefinisikan sebagai:

$$\hat{H}_{ex} = \sum_{n,\alpha} \left[E_0 \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n,\alpha} - (J_{n+1} \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n+1,\alpha} + J_{n-1} \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n-1,\alpha}) + L (\hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n,\alpha+1} + \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n,\alpha-1}) \right], \quad (2)$$

dimana indeks n menunjukkan grup peptida atau asam amino ke- n dalam satu kanal protein, sedangkan indeks α menunjukkan kanal tertentu. $\hat{B}_{n\alpha}^\dagger$ dan $\hat{B}_{n\alpha}$ adalah operator kreasi dan anihilasi boson untuk osilator amida-I. E_0 adalah energi eksiton, $-J_n$ adalah kopling dipol-dipol antar unit terdekat n dengan $n-1$ dalam satu kanal, dan L menyatakan kopling dipole antar unit terdekat pada kanal yang berbeda. $\hat{B}_{n\alpha}^\dagger \hat{B}_{n\alpha}$ merupakan operator jumlah (*number operator*) yang akan menghitung jumlah eksitasi pada setiap molekul, $\hat{B}_{n\alpha}^\dagger \hat{B}_{n\pm 1,\alpha}$ menyatakan transfer eksiton dari molekul peptide ke- n ke $n\pm 1$ dan $\hat{B}_{n\alpha}^\dagger \hat{B}_{n,\alpha\pm 1}$ menyatakan transfer eksiton

dari molekul peptide pada kanal α ke molekul pada kanal $\alpha \pm 1$. Sementara itu, Operator energi fonon dinyatakan sebagai:

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_{n,\alpha} \left[\frac{\hat{P}_{n,\alpha}^2}{M} + w(\hat{u}_{n,\alpha} - \hat{u}_{n-1,\alpha})^2 \right] \quad (3)$$

dengan $\hat{p}_{n\alpha}$ dan $\hat{u}_{n\alpha}$ masing-masing menunjukkan operator momentum dan posisi asam amino, M adalah massa asam amino dan w adalah konstanta pegas ikatan hidrogen.

Terakhir, operator interaksi eksiton-fonon dinyatakan sebagai

$$H_{int} = \sum_{n,\alpha} \chi(\hat{u}_{n+1,\alpha} - \hat{u}_{n-1,\alpha}) \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n,\alpha}, \quad (4)$$

dimana χ adalah parameter kopling eksiton-fonon, yang menentukan tingkat nonlinearitas.

Dalam representasi kuantisasi kedua operator hamiltonian di atas memiliki bentuk sebagai berikut:

$$\hat{H}_{ex} = \sum_{n,\alpha} \left[E_0 \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n,\alpha} - J_{n+1} \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n+1,\alpha} + J_{n-1} \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n-1,\alpha} + L(\hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n,\alpha+1} + \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n,\alpha-1}) \right],$$

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\alpha,k} \hbar \omega_{\alpha,k} \left[\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{1}{2} \right], \text{ dan} \quad (7)$$

$$\hat{H}_{int} = \sum_{n,\alpha,k} B_{n,\alpha,k} (\hat{b}_k + \hat{b}_k^\dagger) \hat{B}_{n,\alpha}^\dagger \hat{B}_{n,\alpha},$$

dengan $B_{n,\alpha,k} = -2i\chi \left(\frac{\hbar}{2Nm\omega_{\alpha,k}} \right)^{1/2} \sin(kl) e^{-iknl}$ dan $\omega_{\alpha,k}$ adalah frekuensi fonon. $\omega_{\alpha,k}$

diperoleh dari relasi dispersi berikut:

$$\omega_{\alpha,k} = 2 \left(\frac{w}{m} \right)^{1/2} |\sin kl/2| \quad (8)$$

dengan l adalah konstanta kisi.

2.2 Fungsi Gelombang Trial (Ansatz II)

Permasalahan dalam model Davydov adalah menentukan fungsi gelombang yang menggambarkan keadaan sistem, karena Hamiltonian Davydov tidak cukup sederhana untuk menentukan fungsi gelombangnya secara eksak. Berdasarkan metode variasi dapat dipilih

sembarang fungsi gelombang yang representatif. Metode Variasi berangkat dari kenyataan bahwa energi rata-rata sebuah sistem merupakan harga ekspektasi dari Hamiltonian pada sistem yang direpresentasikan oleh sembarang fungsi gelombang selalu lebih besar atau sama dengan energi keadaan-dasar sistem.

Fungsi gelombang ansatz yang dipilih untuk model Davydov merupakan hasil perkalian dari dua fungsi gelombang yaitu fungsi gelombang eksiton dan fungsi gelombang fonon [1,2,3,6],

$$|D_2\rangle = |\psi\rangle_{ex} |\varphi\rangle_p \quad (9)$$

$$|D_2\rangle = \sum_{n,\alpha} a_n(t) \hat{B}_{n\alpha}^\dagger |0\rangle_e \hat{U}_\alpha |0\rangle_p \quad (10)$$

$$U_\alpha |0\rangle_p = \exp \left[\sum_{\alpha,k} \left(b_{\alpha k}(t) \hat{b}_{\alpha k}^\dagger - b_{\alpha k}^*(t) \hat{b}_{\alpha k} \right) \right] |0\rangle_p$$

dimana $|a(t)|^2$ dan $|b(t)|^2$ masing-masing menyatakan peluang ditemukannya eksiton dan fonon, sedangkan U adalah operator transformasi uniter yang mentransformasi keadaan dasar atau vakum $|0\rangle_p$ ke keadaan quasi-klasik atau keadaan koheren $|b\rangle_p$ [1,7].

2.3 Persamaan Gerak Model Davydov

Persamaan gerak model Davydov diperoleh dengan menggunakan persamaan Euler-Lagrange berikut:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial \phi_j} = 0 \quad (11)$$

dengan L adalah Lagrangian dari sistem

$$L = \left\langle \psi \left| \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \right| \psi \right\rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle L_t \rangle - \langle H \rangle \quad (12)$$

Persamaan di atas digunakan dengan asumsi fungsi gelombang yang dipilih memenuhi persamaan Schrodinger.

Dengan mensubstitusikan persamaan (7) dan (10) ke dalam (12) dan (11) dan dengan mengembalikan ke dalam ruang nyata diperoleh dua persamaan tergangeng yang terdiri atas dinamika eksiton dan dinamika kisi protein (lattice) seperti tampak pada persamaan (20) berikut:

$$i\hbar\dot{a}_{n,\alpha}(t) = \left(E_0 + \sum_q \frac{1}{2} \hbar\omega_q - \sum_n \chi\beta_n (|a_{n+1,\alpha}|^2 - |a_{n-1,\alpha}|^2) \right) a_{n,\alpha}(t) - \\ (J_{n+1}a_{n+1,\alpha}(t) + J_{n-1}a_{n-1,\alpha}(t)) - L(a_{n,\alpha+1}(t) + a_{n,\alpha-1}(t)) + \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})a_n(t) \quad (20)$$

$$m\ddot{\beta}_{n,\alpha} = w(\beta_{n+1,\alpha} - 2\beta_{n,\alpha} + \beta_{n-1,\alpha}) + \chi(|a_{n+1,\alpha}|^2 - |a_{n-1,\alpha}|^2)$$

Untuk menyederhanakan persamaan gerak dengan tanpa mengubah dinamika sistem dilakukan transformasi tera dengan mengambil

$$a_n = \phi_n \exp \left(-i \left[E_0 + W_0 + \sum_{n'} \chi\beta_{n'} (|a_{n'+1,\alpha}|^2 - |a_{n'-1,\alpha}|^2) \right] t \right), \text{ maka persamaan (20) menjadi:}$$

$$i\hbar\dot{\phi}_n(t) = -(J_{n+1}\phi_{n+1,\alpha}(t) + J_{n-1}\phi_{n-1,\alpha}(t)) + L(\phi_{n,\alpha+1}(t) + \phi_{n,\alpha-1}(t)) + \\ \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})\phi_n(t) \quad (21)$$

$$m\ddot{\beta}_{n,\alpha} = w(\beta_{n+1,\alpha} - 2\beta_{n,\alpha} + \beta_{n-1,\alpha}) + \chi(|\phi_{n+1,\alpha}|^2 - |\phi_{n-1,\alpha}|^2)$$

3 DINAMIKA SOLITON DAVYDOV (SIMULASI NUMERIK)

3.1 Metode Numerik dan Parameter Fisis Protein Alpha Heliks

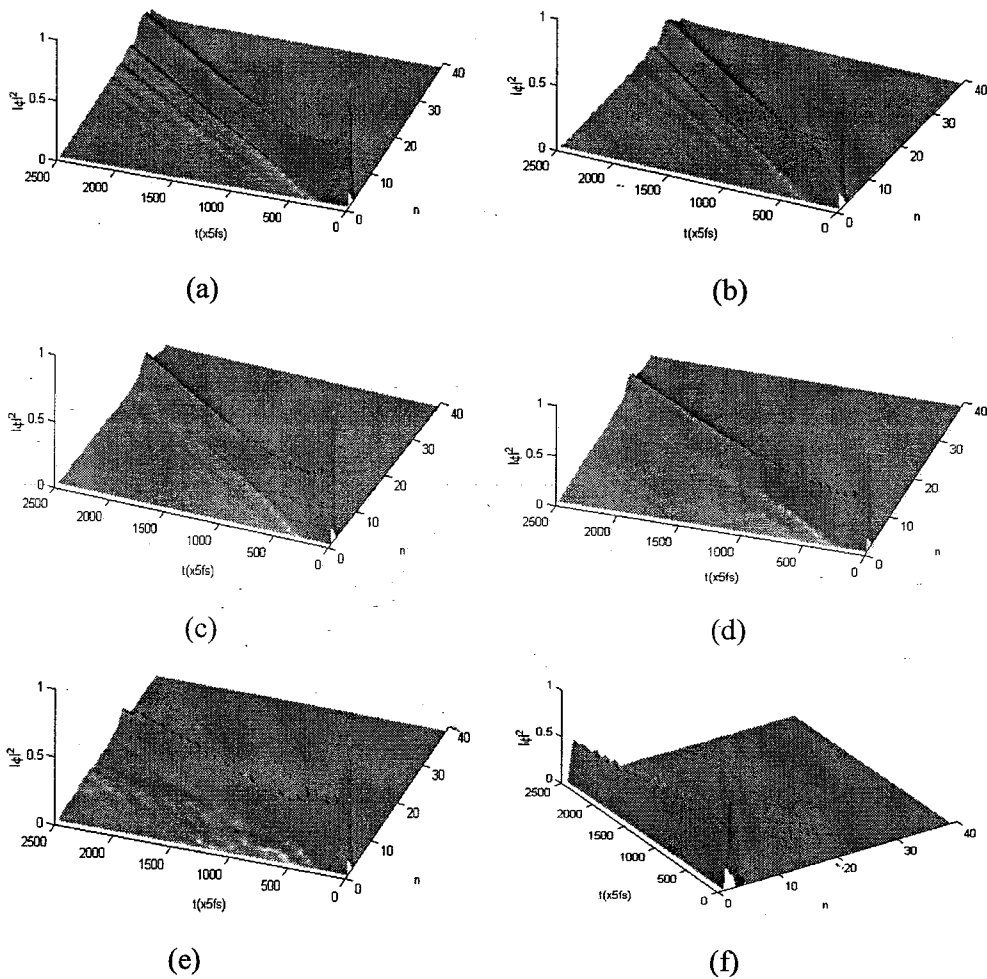
Dinamika soliton Davydov dievaluasi secara numerik menggunakan metode Runge-Kutta orde ke-4, dengan nilai parameter-parameter fisis protein disajikan pada tabel berikut:

Tabel 1 Parameter-parameter fisis Protein Alpha Heliks

Parameter	Description	Value	Unit
W	Spring constant of Hidrogen bond	13	N/m
M	Mass of amino acid	5.7×10^{-25}	Kg
J	Dipole coupling between site in a channel	1.55×10^{-22}	J
χ	Exciton-phonon coupling	35-62	pN
l	Lattice Constant	4.5×10^{-10}	m
L	Dipole coupling between site inter channel	2.46×10^{-22}	J

3.2 Dinamika Soliton Terhadap Variasi Kopling Eksiton-Fonon (χ)

Dinamika soliton ditinjau dengan melakukan variasi terhadap besar nilai kopling eksiton-fonon. Kopling eksiton-fonon menyatakan gaya interaksi antara eksiton dan fonon yang memungkinkan adanya transmisi energy antara eksiton ke fonon dan sebaliknya. Ada tiga dinamika yang teramati dari hasil simulasi yaitu gelombang terdispersi, gelombang soliton berjalan, dan gelombang soliton terlokalisasi. Simulasi untuk berbagai rentang χ disajikan pada gambar berikut:



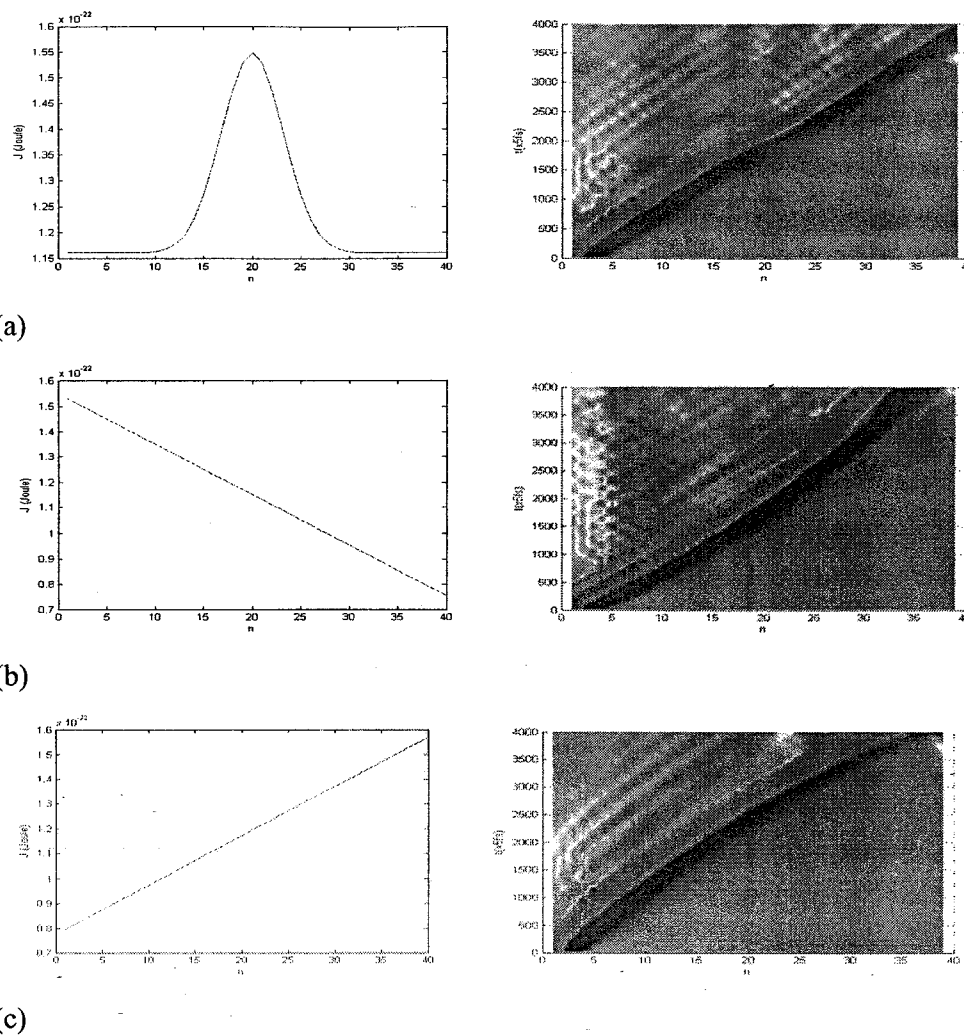
Gambar 2 Dinamika soliton untuk berbagai variasi kekuatan kopling eksiton-fonon.

(a) $\chi=20\text{pN}$, (b) $\chi=30\text{pN}$, (c) $\chi=40\text{pN}$, (d) $\chi=45\text{pN}$, (e) $\chi=60\text{pN}$, (f) $\chi=150\text{pN}$.

Gelombang terdispersi muncul pada saat nilai χ cukup rendah yaitu antara 0 (*decouple case*) hingga 40pN dan nilai χ cukup tinggi antara 60pN hingga 100pN, gelombang soliton teramati pada saat nilai χ antara 40pN hingga 60pN, sedangkan soliton terjebak muncul pada saat nilai χ sangat besar diatas 100pN. Hal tersebut ditunjukkan oleh Gambar 2, (a), (b), (e) menunjukkan gelombang terdispersi, (c) dan (d) menunjukkan gelombang soliton berjalan, sedangkan (f) menunjukkan gelombang soliton terlokalisasi. Gelombang soliton berjalan merupakan salah satu mekanisme yang paling mungkin terjadi pada protein dalam proses transfer energy dimana diketahui bahwa efisiensi transmisi energy pada protein sangat tinggi. Sedangkan gelombang soliton terlokalisasi kemungkinan menunjukkan mekanisme penyimpanan energy pada protein.

3.2 Dinamika Soliton Terhadap Variasi Kopling Dipol-Dipol (J)

Dinamika soliton Davydov berikutnya ditinjau dari variasi kopling dipol-dipol (J). Variasi kopling dipol-dipol terkait dengan variasi struktur fisik protein yang merupakan kombinasi dari sekurang-kurangnya 22 asam amino essential yang masing-masing berbeda struktur kimia pada gugus R-nya. Dari hasil simulasi terlihat bahwa energy dipol-dipol mempengaruhi kecepatan rambat soliton Davydov pada rantai protein. Kecepatan rambat soliton berbanding lurus dengan besar kopling dipol-dipol (J). Pada Gambar. (a) dengan variasi kopling dipol-dipol dibuat berbentuk kurva Gaussian, dihasilkan gelombang soliton yang mengalami pembelokan sesaat (atau dalam hal ini terjadi perubahan kecepatan), dengan kecepatan maksimum terjadi pada $n=20$ tepat pada puncak kurva Gaussian J. Pada gambar (b dan c) variasi kopling dipol-dipol berbentuk garis lurus dengan gradien positif dan negative, dihasilkan gelombang soliton yang masing-masing mengalami perlambatan dan percepatan, ditandai dengan adanya kelengkungan yang berkebalikan pada profil gelombang soliton.



Gambar 3 Dinamika soliton dengan variasi kopling dipol-dipol (J). (a) Variasi kopling dipol-dipol (J) berbentuk kurva gaussian, (b) Variasi kopling dipol-dipol (J) berbentuk garis lurus dengan gradien negatif, (c) Variasi kopling dipol-dipol (J) berbentuk garis lurus dengan gradien positif

4 SIMPULAN

Penulis mensinyalir dua fenomena yang terkait dengan proses transfer dan penyimpanan energi pada protein yaitu kasus gelombang soliton berjalan dan gelombang soliton

terlokalisasi. Kedua kasus ini dapat dikontrol dengan mengatur besar parameter kopling baik kopling eksiton-fonon (χ) maupun parameter kopling dipol-dipol (J). Variasi asam amino pada rantai protein dalam hal ini dinyatakan dalam bentuk variasi kopling dipol-dipol (J) mengakibatkan perubahan kecepatan rambat gelombang soliton pada rantai protein, dimana kecepatan rambat berbanding lurus dengan kekuatan kopling dipol-dipol (J).

DAFTAR PUSTAKA

- [1] Davydov, A S. 1982, *Biology and Quantum Mechanics*, Pergamon Press, New York.
- [2] Forner, W. 1997, *Davydov Soliton Dynamics: Application and Calculation of Vibrational Spectra*. J. Mol. Model, 3, 78-116.
- [3] Forner, W. 1991, *Quantum and disorder effects in Davydov soliton theory*. Phys. Rev. A 44, 4.
- [4] Hennig, Dirk. 2002, *Energy transport in α -helical protein models: one-strand versus three-strand systems*. Phys. Rev. B 65, 174302.
- [5] Murray, Robert K, D. K. Granner, P. A. Mayes, V. W. Rodwell. 2003. *Biokimia Harper (alih bahasa: dr. Andry Hartono)*. EGC, Jakarta.
- [6] Scott, A C.1992, *Davydov's Soliton*. Phys. Rep. 217.
- [7] Tannoudji, C C, Bernard Diu, Franck Laloe.1977. *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, France.