

SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL DAN MODEL MATEMATIKA: POTENSI YADG SEBAGAI RESEPTOR BIOSENSOR AMPEROMETRIK DETEKSI TNT

NINA ALEXSANDRA



**PROGRAM STUDI BIOFISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PERNYATAAN MENGENAI TESIS DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa tesis dengan judul “Simulasi Dinamika Molekul dan Model Matematika: Potensi yadG sebagai Reseptor Biosensor Amperometrik Deteksi TNT” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir tesis ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Agustus Tahun 2025

Nina Alexsandra
G7501241007



RINGKASAN

NINA ALEXSANDRA. Simulasi Dinamika Molekul dan Model Matematika: Potensi yadG sebagai Reseptor Biosensor Amperometrik Deteksi TNT. Dibimbing oleh SETYANTO TRI WAHYUDI dan AGUS KARTONO.

Deteksi cepat dan selektif senyawa peledak seperti 2,4,6-trinitrotoluena (TNT) sangat penting dalam bidang keamanan dan pemantauan lingkungan. Studi ini mengevaluasi potensi reseptor transporter *Escherichia coli* K-12, yaitu yadG, sebagai komponen reseptor dalam biosensor amperometrik berbasis protein untuk deteksi TNT. Simulasi dinamika molekul menunjukkan adanya interaksi kuat antara yadG dan TNT, dengan energi bebas ikatan (ΔG_{total}) sebesar $-17,67$ kkal/mol, yang mengindikasikan stabilitas tinggi dalam kondisi fisiologis. Dalam sistem biosensor, koefisien difusi TNT diperkirakan sebesar $6,47 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Kurva kalibrasi menunjukkan hubungan linier antara konsentrasi TNT dan sinyal arus listrik, dengan sensitivitas $0,00468 \mu\text{A}/\mu\text{M}$, batas deteksi (LOD) sebesar $7,05 \mu\text{M}$, dan batas kuantifikasi (LOQ) sebesar $21,37 \mu\text{M}$. Parameter-parameter ini menunjukkan kemampuan sensor untuk mendeteksi TNT secara sensitif dan akurat di atas ambang batas yang relevan. Profil konsentrasi TNT juga menunjukkan transportasi yang efisien dan konsisten menuju permukaan elektroda. Temuan ini menyoroti potensi yadG sebagai elemen pengenal selektif dalam biosensor amperometrik untuk deteksi TNT secara real-time dengan performa analitik yang menjanjikan.

Kata kunci: biosensor amperometrik, laju difusi, simulasi dinamika molekul, TNT, yadG

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

SUMMARY

NINA ALEXSANDRA. Molecular Dynamics Simulation and Mathematical Modeling: The Potential of yadG as a Receptor in Amperometric Biosensor for TNT Detection. Supervised by SETYANTO TRI WAHYUDI and AGUS KARTONO.

Rapid and selective detection of explosive compounds such as 2,4,6-trinitrotoluene (TNT) is critical in security and environmental monitoring. This study evaluates the potential of the *Escherichia coli* K-12 transporter receptor yadG as a receptor component in a protein-based amperometric biosensor for TNT detection. Molecular dynamics simulations revealed a strong interaction between yadG and TNT, with a binding free energy (ΔG_{total}) of $-17,67$ kcal/mol, indicating high stability under physiological conditions. In the biosensor system, the diffusion coefficient of TNT was estimated at $6,47 \times 10^{-10}$ m²/s. The calibration curve showed a linear relationship between TNT concentration and current signal, with a sensitivity of $0,00468$ $\mu\text{A}/\mu\text{M}$, a limit of detection (LOD) of $7,05$ μM , and a limit of quantification (LOQ) of $21,37$ μM . These parameters demonstrate the sensor's capability for sensitive and accurate TNT detection above relevant thresholds. The concentration profile of TNT indicated efficient and consistent transport toward the electrode surface. These findings highlight the potential of yadG as a selective recognition element in amperometric biosensors for real-time TNT detection with promising analytical performance.

Keywords: amperometric biosensor, diffusion rate, molecular dynamics, TNT, yadG



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2025¹
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.

SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL DAN MODEL MATEMATIKA: POTENSI YADG SEBAGAI RESEPTOR BIOSENSOR AMPEROMETRIK DETEKSI TNT

NINA ALEXSANDRA

Tesis
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Magister pada
Program Studi Biofisika

**PROGRAM STUDI BIOFISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

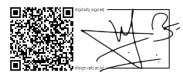
Tim Penguji pada Ujian Tesis:
1 Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada Wjiaya Puspita, S.Si., M.Si.

Judul Tesis : Simulasi Dinamika Molekul dan Model Matematika: Potensi yadG sebagai Reseptor Biosensor Amperometrik Deteksi TNT
Nama : Nina Aleksandra
NIM : G7501241007

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. Setyanto Tri Wahyudi, S.Si., M.Si.

Pembimbing 2:
Dr. Agus Kartono, S.Si., M.Si.



Diketahui oleh

Ketua Program Studi:
Dr. Mersi Kurniati, S.Si., M.Si.
NIP 19681117 199802 2 001

Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam:
Dr. Berry Juliandi, S.Si., M.Si.
NIP 19780723 200701 1 001



Tanggal Ujian: 6 Agustus 2025
Tanggal Lulus:

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Penelitian dilaksanakan sejak bulan November 2024 sampai bulan Juni 2025, dengan judul “Simulasi Dinamika Molekul dan Model Matematika: Potensi yadG sebagai Reseptor Biosensor Amperometrik Deteksi TNT”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada Bapak Dr. Setyanto Tri Wahyudi, S.Si., M.Si dan Dr. Agus Kartono, S.Si., M.Si yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada pembimbing akademik, moderator seminar, dan penguji luar komisi pembimbing. Di samping itu, penulis juga mengucapkan banyak terima kasih kepada Ibu, Bapak, Kakak, Adik, sahabat, civitas Fisika IPB yang telah memberikan dukungannya kepada penulis. Penulis menyadari bahwa masih terdapat banyak kekurangan serta kekeliruan dalam penulisan tesis ini. Oleh karena itu, penulis mengharapkan adanya kritik dan saran membangun. Demikian prakata ini dibuat, semoga penelitian yang akan dilaksanakan berjalan lancar dan bermanfaat di kemudian hari.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Agustus 2025

Nina Alessandra



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL

DAFTAR GAMBAR

DAFTAR LAMPIRAN

I	PENDAHULUAN	1
1.1	Latar Belakang	2
1.2	Rumusan Masalah	2
1.3	Tujuan	2
1.4	Manfaat	2
1.5	Ruang Lingkup	2
1.6	Hipotesis	2
II	TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1	<i>Escherichia coli</i>	3
2.1.1	yadG	3
2.2	Senyawa-senyawa Nitroaromatik dan Aromatik	3
2.3	Data Eksperimental Konstruksi Biosensor	5
2.4	Simulasi Dinamika Molekul	6
2.4.1	MMGBSA	7
2.5	Biosensor Amperometrik	8
2.6	Pemodelan Matematika Biosensor	9
III	METODE	13
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	13
3.2	Alat dan Bahan	13
3.2.1	Alat	13
3.2.2	Bahan	13
3.3	Prosedur Kerja	14
3.3.1	Simulasi Dinamika Molekul	14
3.3.1.1	Preparasi Simulasi Dinamika Molekul	14
3.3.1.2	Running Simulasi Dinamika Molekul	15
3.3.2	Integrasi Model Matematika	16
3.4	Analisis data	16
3.4.1	Analisis Hasil Simulasi Dinamika Molekul	16
3.4.2	Analisis Hasil <i>Running</i> Model Biosensor	17
IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	18
4.1	Simulasi Dinamika Molekul	18
4.2	Analisis Laju Difusi pada Sistem Biosensor Amperometrik	20
4.3	Arus Amperometrik terhadap Waktu I(t)	21
4.4	Profil Konsentrasi Senyawa Nitro Aromatik	22
4.5	Kalibrasi Biosensor Amperometrik	24
V	SIMPULAN DAN SARAN	25
5.1	Simpulan	25
5.2	Saran	25
	DAFTAR PUSTAKA	26

LAMPIRAN

30

RIWAYAT HIDUP

35

@Hak cipta milik IPB University

IPB University



- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

DAFTAR TABEL

1	Nilai EC200 dari <i>promoter-based bioluminescent reporter strains</i> yang teridentifikasi	6
2	Parameter model simulasi dinamika molekul dan biosensor amperometrik yadG untuk deteksi TNT	9
3	Parameter kondisi batas dan respons arus pada model biosensor amperometrik yadG untuk deteksi TNT	10
4	Parameter arus <i>steady-state</i> dan karakteristik membran pada biosensor amperometrik yadG	11
5	Parameter diskritisasi dan variabel numerik dalam simulasi pemodelan biosensor amperometrik yadG	12
6	Energi ikatan yadG dengan senyawa nitro aromatik	18
7	Parameter fisik dan laju difusi senyawa nitro aromatik	20

DAFTAR GAMBAR

1	Struktur yadG <i>Escherichia coli</i> (strain K12)	3
2	Struktur dua dimensi (a) 2,4,6-trinitrotoluena, (b) 2-nitrotoluena, (c) 3-nitrotoluena, (d) 4-nitrotoluena, (e) 1,4-dinitrobenzena, (f) 1,3-dinitrobenzena, (g) 2,4-dinitrotoluena, (h) 2,6-dinitrotoluena	4
3	Struktur dua dimensi (a) toluena, (b) benzena, (c) nitrobenzena	4
4	Respons elemen promotor yadG terhadap berbagai senyawa indikator TNT (Tan <i>et al.</i> 2015)	5
5	Reaksi Kekuatan Elemen Promotor yadG terhadap Berbagai Konsentrasi TNT (Tan <i>et al.</i> 2015)	5
6	Distribusi area kerja biosensor amperometrik (Zadeh <i>et al.</i> 2020)	8
7	Skema kerja biosensor amperometrik	8
8	Kompleks protein-ligan (a) 2,4,6-TNT, (b) 2,6-DNT, (c) 2,4-DNT	13
9	Kompleks protein-ligan (a) 2-NT, (b) 1,3-DNB, (c) 3-NT, (d) 1,4- DNB, (e) 4-NT, (f) Benzena, (g) Nitrobenzena, (h) Toluena	14
10	Gambar 10 Diagram alir penelitian	14
11	Fluktuasi energi ikatan kompleks yadG–TNT simulasi 100 ns	19
12	Perbandingan energi ikatan total (ΔG) yadG dengan berbagai senyawa	19
13	Simulasi arus amperometrik terhadap waktu untuk TNT ($D = 6,47 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$) pada Durasi (a) 10 detik dan (b) 5 detik	21
14	Simulasi arus amperometrik pada berbagai C_0 TNT	21
15	Simulasi arus amperometric untuk 3 senyawa nitro aromatic	22
16	Profil konsentrasi senyawa nitro aromatik (a) TNT, (b) 2,4-DNT, dan (c) 2,6-DNT integrasi dengan nilai ΔG	22
17	Profil konsentrasi senyawa nitro aromatik (a) TNT, (b) 2,4-DNT, dan (c) 2,6-DNT terhadap waktu dan panjang sensor	23
18	Kurva kalibrasi amperometrik senyawa TNT	24



DAFTAR LAMPIRAN

1	Analisis interaksi hidrofobik ligan dengan reseptor	31
2	Residu asam amino reseptor yadG yang membentuk ikatan hidrogen dengan ligan uji	32
3	Profil konsentrasi senyawa (a) 2NT, (b) 3NT, (c) 4NT, (d) 3DB, (e) 4DB, (f) BEN, (g) TOL, (h) NIT integrasi dengan nilai ΔG	33
4	Profil konsentrasi senyawa (a) 2NT, (b) 3NT, (c) 4NT, (d) 3DB, (e) 4DB, (f) BEN, (g) TOL, (h) NIT terhadap waktu dan panjang sensor	34