**Studi Stabilitas dan Aktivitas Lipase Isolat Manuk (lipMNK) dalam Pelarut Asetonitril**

**dengan Pendekatan Simulasi Dinamika Molekul**

Dian Herasari1, Ilim1, Kamisah D. Pandiangan1, Mita Rilyanti1, Heri Satria1

1Jurusan Kimia, Fakultas MIPA Universitas Lampung

Lipase Manuk (lipMNK) adalah lipase dengan lid ganda dari mikroorganisme termofilik, *Geobacillus uzenencis*, yang diperoleh dari kawah Manuk, Garut, Jawa Barat, Indonesia. Mekanisme katalisis lipase melibatkan pergerakan dinamis segmen lid dari keadaan lid tertutup menjadi keadaan lid terbuka. Salah satu faktor yang mempengaruhi dinamika konformasi segmen lid adalah polaritas pelarut. Beberapa penelitian menunjukkan bahwa adanya asetonitril dalam konsentrasi tertentu dapat meningkatkan aktivitas lipase. Pada penelitian ini, dipelajari efek penambahan asetonitril terhadap stabilitas dan aktivitas lipMNK pada level atom dengan pendekatan simulasi dinamika molekul (MD). MD dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak AMBER, force field ff03.r1. temperatur 358K selama 100 ns simulasi. Hasil penelitian menyarankan bahwa struktur lipMNK nampak stabil pada rentang asetonitril hingga 70%. Konsentrasi asetonitril 20% merupakan konsentrasi terbaik dari sisi stabilitas maupun aktvitas lipMNK. Gerakan pembukaan dan penutupan lid lipMNK berlangsung melalui mekanisme yang berbeda. Pada gerakan pembukaan lid kedua segmen lid bergerak bersamaan, sedangkan gerakan penutupan lid diinisiasi oleh segmen lid kecil

Kata kunci: lipMNK, lid, asetonitril, simulasi dinamika molekul