

Penambatan Molekuler Interaksi Ligan Senyawa Propolis Terhadap Reseptor *Lactobacillus acidophilus* = Molecular Docking of Propolis Ligand against *Lactobacillus acidophilus* Receptors

Milka Afrali, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920538265&lokasi=lokal>

Abstrak

Pendahuluan : Data Riset Kesehatan Dasar Indonesia pada tahun 2018 menyatakan bahwa sebesar 57,6% penduduk Indonesia mempunyai masalah gigi dan mulut. Karies masih memiliki proporsi terbesar sebagai permasalahan mulut di Indonesia dengan presentasi 45,3% dibandingkan permasalahan kesehatan mulut lainnya. Bakteri yang dianggap dominan untuk inisiasi karies selain *Streptococcus mutans* adalah *Lactobacillus acidophilus* yang dikenal sebagai bakteri penghasil asam laktat. Tujuan: Mengeksplorasi interaksi antara komponen Ligan Propolis dengan S-Layer protein (SlpA) dari bakteri *Lactobacillus acidophilus* melalui uji penambatan molekuler. Metode : Penelitian eksperimental komputasional *in silico* melalui molecular docking untuk menguji interaksi molekuler dari ligan Propolis terhadap reseptor SlpA *Lactobacillus acidophilus*. Data hasil interaksi molekuler yang berupa gambar 2D dan data histogram kemudian dianalisis dan diinterpretasikan untuk melihat afinitas ikatan dari interaksi antara ligan dengan reseptor. Hasil: terdapat interaksi antara ligan Propolis dengan reseptor SlpA dari *Lactobacillus acidophilus*. Kesimpulan : Adanya afinitas ikatan yang ditandai oleh energi bebas Gibbs (G), konsentrasi inhibisi (Ki), ikatan hidrogen dan ikatan Van der Waals yang terjadi antara ligan Propolis dan reseptor SlpA *Lactobacillus acidophilus* ini menandakan keberadaan interaksi antara ligan dan reseptor tersebut. Namun, perlu adanya penelitian lebih lanjut terkait interaksi antibakteri dan potensi lainnya yang dimiliki oleh propolis dengan melalui uji *in vitro* atau *in vivo*.

.....Introduction: Riskesdas 2018 stated that 57.6% of the Indonesian population had dental and oral problems. Caries still has the largest proportion of oral problems in Indonesia with a presentation of 45.3% compared to other oral health problems. The bacteria that is considered dominant for caries initiation apart from *Streptococcus mutans* is *Lactobacillus acidophilus* which is known as a lactic acid producing bacteria. Objective: To explore the interaction between Propolis Ligand components and S-Layer protein (SlpA) from the bacterium *Lactobacillus acidophilus* through a molecular docking test. Methods: *In silico* computational experimental research using molecular docking to examine the molecular interactions of the Propolis ligand against the SlpA receptor of *Lactobacillus acidophilus*. Data resulting from molecular interactions in the form of 2D images and histogram data are then analyzed and interpreted to determine the binding affinity of the interaction between the ligand and the receptor. Results: there was an interaction between the Propolis ligand and the SlpA receptor from *Lactobacillus acidophilus*. Conclusion: The existence of binding affinity characterized by Gibbs free energy (G), inhibitory concentration (Ki), hydrogen bonds and Van der Waals bonds that occur between the Propolis ligand and the SlpA receptor of *Lactobacillus acidophilus* indicates the existence of an interaction between the ligand and the receptor. However, further research is needed regarding the antibacterial interactions and other potential of propolis through *in vitro* or *in vivo* tests.