



Identifikasi Mekanisme Molekuler Senyawa Bioaktif Peptida Laut sebagai Kandidat Inhibitor Angiotensin-I Converting Enzyme (ACE)

(Identification of molecular mechanisms of marine bioactive peptides as candidates for Angiotensin-I Converting Enzyme (ACE) inhibitors)

Taufik Muhammad Fakh* & Mentari Luthfika Dewi

Program Studi Farmasi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Islam Bandung, Jl. Ranga Gading No. 8, Tamansari, Kec. Bandung Wetan, Kota Bandung, Jawa Barat 40116

ABSTRACT: Marine peptide bioactive compounds are currently the focus of research because they have unique properties. One important biological roles of these peptide compounds is an antihypertensive agent against Angiotensin-I Converting Enzyme (ACE) activity. There are several peptide compounds that have been proved to inhibit ACE receptors, such as peptide compounds produced by sea cucumbers (*Acaudina molpadioides*), blue shellfish (*Mytilus edulis*), and tuna fish (*Thunnini*). In this research, identification and evaluation of interactions that occur between peptide compounds with ACE receptors were carried out using protein-peptide docking methods. Sequencing of peptide compounds was modeled using PEP-FOLD server. The best conformation was chosen to explore the interaction of ACE receptor macromolecules using PatchDock software. Interactions that occur were observed further using BIOVIA Discovery Studio 2020 software. Based on the results of protein-peptide docking, blue shellfish peptide compounds and tuna fish had a good affinity for the ACE receptor, in which the ACE score were -391.62 kJ/mol and -516.56 kJ/mol, respectively. Thus, the marine peptide bioactive compound is predicted to be a promising candidate for peptide-based ACE receptor inhibitors.

Keywords: antihypertensive; marine bioactive peptides; Angiotensin-I Converting Enzyme (ACE) inhibitors; inhibitory pattern; protein-peptide docking.

ABSTRAK: Senyawa bioaktif peptida laut saat ini menjadi fokus penelitian karena memiliki sifat yang unik. Salah satu peran biologis penting dari senyawa peptida tersebut adalah sebagai agen antihipertensi terhadap aktivitas *Angiotensin-I Converting Enzyme* (ACE). Terdapat beberapa senyawa peptida yang telah terbukti mampu menghambat reseptor ACE, seperti senyawa peptida yang dihasilkan oleh teripang (*Acaudina molpadioides*), kerang biru (*Mytilus edulis*), dan ikan tuna (*Thunnini*). Dalam penelitian ini dilakukan identifikasi dan evaluasi terhadap interaksi yang terjadi antara senyawa peptida dengan reseptor ACE menggunakan metode penambatan molekuler berbasis protein-peptida. *Sequencing* senyawa peptida dimodelkan terlebih dahulu menggunakan *server* PEP-FOLD. Konformasi terbaik dipilih untuk dilakukan studi interaksi terhadap makromolekul reseptor ACE menggunakan *software* PatchDock. Interaksi yang terjadi diamati lebih lanjut menggunakan *software* BIOVIA Discovery Studio 2020. Berdasarkan hasil dari penambatan molekuler berbasis protein-peptida, senyawa peptida kerang biru dan ikan tuna memiliki afinitas yang baik terhadap reseptor ACE, yaitu dengan ACE *score* masing-masing adalah $-391,62$ kJ/mol dan $-516,56$ kJ/mol. Dengan demikian, senyawa bioaktif peptida laut tersebut diprediksi dapat dipilih sebagai kandidat inhibitor reseptor ACE berbasis peptida.

Kata kunci: antihipertensi; senyawa bioaktif peptida laut; inhibitor Angiotensin-I Converting Enzyme (ACE); pola penghambatan; penambatan molekuler berbasis protein-peptida.

Pendahuluan

Lautan merupakan wilayah paling besar di bumi apabila dibandingkan dengan daratan yaitu dengan presentase mencapai 70%. Selain itu, laut juga kaya akan sumber daya alam, diantaranya senyawa bioaktif yang terdapat dalam berbagai organisme seperti ikan, kerang, moluska, gastropoda, sefalopoda, krustasea, dan ekinodermata, yang secara signifikan berkontribusi pada pengembangan ekonomi dan penelitian [1,2]. Organisme

laut hidup pada habitat yang kompleks dan kondisi ekstrim, seperti salinitas, tekanan, suhu, dan iluminasi sehingga mampu menghasilkan berbagai macam metabolit sekunder yang tidak dapat ditemukan di tempat lain [2]. Di samping itu, organisme laut juga bermanfaat dalam bidang kefarmasian karena berbagai aktivitas yang dimilikinya, diantaranya aktivitas antihipertensi [3].

Article history

Received: 14 Mar 2020
Accepted: 22 April 2020
Published: 30 April 2020

Access this article



*Corresponding Author: Taufik Muhammad Fakh

Program Studi Farmasi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Islam Bandung, Jl. Ranga Gading No. 8, Kota Bandung, Jawa Barat 40116 | Email: taufikmuhammadf@gmail.com