

## Interaksi Molekuler Peptida Antimikrobal Lendir Kulit Ikan Lele Kuning (*Pelteobagrus fulvidraco*) terhadap Penicillin-Binding Protein 3 (PBP3) pada *Escherichia coli* secara *In silico*

### *Molecular Interaction of Antibacterial Peptides of Yellow Fish Skin (*Pelteobagrus fulvidraco*) against Penicillin-Binding Protein 3 (PBP3) in *Escherichia coli* by *In silico**

Taufik Muhammad Fakhri<sup>1\*</sup>, Mentari Luthfika Dewi<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Program Studi Farmasi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Islam Bandung, Jalan Ranga Gading No. 8, Bandung, Indonesia, 40116

\*Email : [taufikmuhammadf@gmail.com](mailto:taufikmuhammadf@gmail.com)

doi: <http://dx.doi.org/10.29405/j.bes/4148-554951>

Received: 30 Januari 2020 | Accepted: 31 Mei 2020 | Published: 30 Juni 2020



#### Abstrak

**Pendahuluan:** Lendir kulit ikan baru-baru ini dikenal sebagai sumber potensial peptida antimikrobal yang berfungsi untuk memberikan pertahanan pertama pada manusia terhadap bakteri patogen, seperti *Escherichia coli*. Beberapa peptida antimikrobal yang dihasilkan oleh lendir kulit ikan lele kuning (*Pelteobagrus fulvidraco*) terbukti mampu menghambat *Penicillin-Binding Protein 3* (PBP3) pada *Escherichia coli*, antara lain *Pelteobagrins*, *Myxinidin*, *Pleurocidin*, dan *Pardaxin-P1*. Penelitian ini bertujuan untuk melakukan identifikasi, evaluasi, dan eksplorasi terhadap interaksi molekuler antara molekul peptida antimikrobal dengan *Penicillin-Binding Protein 3* (PBP3) pada *Escherichia coli* menggunakan metode penambatan molekuler berbasis protein-peptida. **Metode:** Sekuens peptida antimikrobal terlebih dahulu dimodelkan ke dalam bentuk konformasi 3D menggunakan server *PEP-FOLD*. Konformasi terbaik hasil pemodelan dipilih untuk selanjutnya dilakukan studi interaksi terhadap makromolekul *Penicillin-Binding Protein 3* (PBP3) pada *Escherichia coli* menggunakan perangkat lunak *PatchDock*. Interaksi yang terbentuk kemudian diamati lebih lanjut menggunakan perangkat lunak *BIOVIA Discovery Studio 2020*. **Hasil:** Hasil dari penambatan molekuler menunjukkan bahwa peptida *Pardaxin-P1* memiliki afinitas paling baik, yaitu dengan *ACE score*  $-1402,39$  kJ/mol. **Kesimpulan:** Dengan demikian, peptida antimikrobal tersebut diprediksi dapat dipilih sebagai kandidat antimikroba alami.

**Kata kunci:** peptida antimikrobal; penicillin-binding protein 3 (PBP); *escherichia coli*; ikan lele kuning (*pelteobagrus fulvidraco*); studi *in silico*

#### Abstract

**Background:** Fish skin mucus has recently been recognized as a potential source of antimicrobial peptides that serve to provide the first defense in humans against pathogenic bacteria, including *Escherichia coli*. Some antimicrobial peptides produced by yellow catfish skin mucus (*Pelteobagrus fulvidraco*) can inhibit *Penicillin-Binding Protein 3* (PBP3) in *Escherichia coli*, such as *Pelteobagrins*, *Myxinidin*, *Pleurocidin*, and *Pardaxin-P1*. This research aims to identify, evaluate, and explore molecular interactions between antimicrobial peptide molecules and *Penicillin-Binding Protein 3* (PBP3) on *Escherichia coli* using protein-peptide docking methods. **Methods:** Antimicrobial peptide sequences were modeled into 3D conformation using the *PEP-FOLD* server. The best conformation of the modeling results was chosen for the next study of interactions against the *Penicillin-Binding Protein 3* (PBP3) macromolecules on *Escherichia coli* using *PatchDock*. The formed interactions were then observed further using the *BIOVIA Discovery Studio 2020*. **Results:** The results of protein-peptide docking showed that the *Pardaxin-P1* peptide had the best affinity, with an *ACE score* of  $-1402.39$  kJ/mol. **Conclusions:** Therefore, the antimicrobial peptide is predicted to be selected as a natural antimicrobial candidate.

**Keywords:** antimicrobial peptide; penicillin-binding protein 3 (PBP3); *escherichia coli*; yellow catfish (*pelteobagrus fulvidraco*); *in silico* study