

Analisis Mekanisme Antibakteri Senyawa Neral Daun Kemangi (*O. Americanum*) terhadap Enzim Muramidase A dan Glucosyltransferase B *Streptococcus Mutans* Secara *In Silico*

ABSTRAK

Kemangi (*O. americanum*) merupakan tanaman herbal berasal dari Indonesia dan diketahui memiliki aktivitas antibakteri yang baik. Kandungan terbanyak dari *O. americanum* adalah terpenoid. Neral merupakan turunan dari terpenoid yang mempunyai presentase sebesar 27,2%. Bahan alam kemangi (*O. americanum*) diharapkan menjadi salah satu alternatif bahan obat kumur yang memiliki efek antibakteri terhadap biofilm *S. mutans*. *S. mutans* dianggap sebagai kontributor penting dalam pembentukan biofilm kariogenik dengan menghasilkan glukon dalam jumlah besar sebagai matriks polisakarida ekstraseluler (EPS) dari sukrosa melalui *glukosiltransferase* (Gtfs) seperti Gtf B. Penghambatan biofilm dapat dijadikan tindakan untuk mencegah pembentukan biofilm. Salah satu cara adalah mengganggu dinding sel bakteri dengan menghambat biosintesis peptidoglikan. Enzim muramidase A (Mur A) berkontribusi pada biosintesis peptidoglikan. Tujuan dari penelitian ini adalah menganalisis interaksi yang terbentuk antara senyawa neral dari daun *O. americanum* terhadap enzim *muramidase A* dan *glukosiltransferase B* pada *S. mutans* dengan metode *in silico*

Penelitian dilakukan dengan *docking* yang memprediksi interaksi antar molekul. Analisis aktivitas antibakteri neral kemangi (*O. americanum*) dilakukan dengan menggunakan target protein enzim muramidase A dan *Glucosyltransferase B* *S. mutans* secara *in silico* untuk menemukan senyawa aktif yang diharapkan dapat berperan dalam eksplorasi obat. Simulasi *molekular docking* kandungan neral dalam kemangi (*O. americanum*) terhadap enzim muramidase A dan *Glucosyltransferase B* *S. mutans* menggunakan Pyrx 0,8.

Hasil penelitian menunjukkan senyawa neral dalam kemangi (*O. americanum*) memiliki aktivitas daya antibakteri terhadap enzim muramidase A dan *Glucosyltransferase B* *S. mutans* dilihat dari *binding affinity*, jenis ikatan dan panjang ikatan secara *in silico*. Analisis *in silico* menunjukkan neral sebagai penghambat enzim muramidase A dan *Glucosyltransferase B*. Afinitas pengikatan terhadap enzim MurA dan *Glycosyltransferase B* adalah -5,1 Kcal/mol dan -5,1 Kcal/mol, ikatan hidrogen pada enzim muramidase A yaitu THR304, ASP305, VAL16 dengan panjang ikatan pada ASP 305 sebesar 2,939140 Å, sedangkan ikatan hydrogen pada *Glucosyltransferase B* yaitu GLN960 dengan panjang ikatan pada GLN960 sebesar 2,864795 Å.

Simpulan dalam penelitian ini adalah senyawa neral memiliki potensi sebagai alternatif agen antibakteri alami baru melalui penghambatan enzim muramidase A dan *Glucosyltransferase B* pada *S. mutans*.

Kata kunci : *Molecular docking*, *Streptococcus mutans*, Enzim muramidase A, *Glucocyltransferase B*

Analysis Of Neral Antibacterial Mechanisms Of Basil Leaves (O.Americanum) Toward Muramidase A Enzymes And Glucosyltransferase B IN Streptococcus mutans By In Silico

ABSTRACT

Basil (O. americanum) is an herbal plant originating from Indonesia and is known to have good antibacterial activity. The largest content of O. americanum is trepenoid. The derivatives of terpenoids are mineral compounds which have a percentage of 27.2%. The natural ingredient of basil (O. americanum) is expected to be an alternative mouthwash that has an antibacterial effect on S. mutans biofilms. S. mutans is considered as an important contributor in the formation of cariogenic biofilms by producing large amounts of glucans as extracellular matrix polysaccharides (EPS) from sucrose through glucosyltransferases (Gtfs) such as Gtf B. Inhibition of biofilms can be used as an action to prevent biofilm formation. One way is to disrupt the bacterial cell wall by inhibiting peptidoglycan biosynthesis. Muramidase A (Mur A) enzyme contributes to the biosynthesis of peptidoglycan. The purpose of this study was to analyze the interactions formed between the mineral compounds from O. americanum leaves against the enzyme muramidase A and glucosyltransferase B in S. mutans using the in silico method.

The research was carried out by docking which predicts interactions between molecules. Analysis of the natural antibacterial activity of basil (O.americanum) was carried out using in silico target protein enzymes muramidase A and Glucosyltransferase B S. mutans to find active compounds that are expected to play a role in drug exploration. Molecular simulation of docking of mineral content in basil (O. americanum) against muramidase A and Glucosyltransferase B S. mutans enzymes using Pyrx 0.8.

The results showed that the mineral compounds in basil (O. americanum) had antibacterial activity against the enzymes muramidase A and Glucosyltransferase B S. mutans seen from their binding affinity, type of bond and bond length in silico. In silico analysis showed mineral as an inhibitor of muramidase A and Glucosyltransferase B enzymes. VAL16 with the bond length at ASP 305 is 2.939140 Å, while the hydrogen bond in Glucosyltransferase B is GLN960 with the bond length at GLN960 is 2.864795 Å.

The conclusion in this study is that mineral compounds have potential as an alternative to new natural antibacterial agents through inhibition of the enzymes muramidase A and Glucosyltransferase B in S. mutans.

Key words: *Molecular docking, Streptococcus mutans, muramidase A enzyme, Glucosyltransferase*