

Studi Interaksi Molekuler Senyawa Propolis Sebagai Potensi Antiinflamasi Terhadap Toll-Like Receptor 4 Pada Terapi Periodontitis Secara In Silico = Molecular Interaction of Propolis Compounds as Potential Anti-inflammatory Against Toll-Like Receptor 4 in Periodontitis Therapy: In Silico Study

Nadia Arum Ramadhani, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920537979&lokasi=lokal>

Abstrak

Latar Belakang: Menurut data Riset Kesehatan Dasar (Riskesdas) 2018, prevalensi penyakit periodontitis menduduki peringkat kedua terbanyak setelah karies gigi, yaitu sebesar 74,1% di Indonesia. Periodontitis merupakan penyakit inflamasi yang dihubungkan dengan kerusakan jaringan periodontal. Dalam perjalanan periodontitis, TLR-4 berperan penting dalam respon imun dan patogenesis inflamasi periodontitis karena dapat mengenali bakteri gram negatif lipopolisakarida (LPS). Propolis merupakan salah satu zat alami berupa produk resin yang memiliki banyak aktivitas biologis, salah satunya antiinflamasi. **Tujuan:** Mengetahui interaksi molekuler senyawa propolis yang berpotensi sebagai antiinflamasi terhadap TLR-4 pada terapi periodontitis melalui studi penambatan molekuler. **Metode:** Studi eksperimental komputasional secara *in silico* menggunakan perangkat Autodock Tools 1.5.6 dan BIOVIA Discovery Studio Visualizer 2021 untuk menguji interaksi dan afinitas ikatan dari ligan propolis terhadap reseptor target TLR-4. Hasil interaksi akan dianalisis untuk menilai konformasi terbaik dari suatu molekul dan afinitas pengikatannya. Penambatan molekuler dilakukan dengan menambatkan 7 senyawa propolis yang berpotensi sebagai antiinflamasi terhadap TLR-4 sebagai reseptor yang berperan dalam proses inflamasi. **Hasil:** Terdapat interaksi molekuler ikatan antara ligan propolis dengan reseptor TLR-4. Dari ketujuh ligan propolis yang diuji, senyawa Adhyperforin memiliki afinitas terbaik dibandingkan ligan propolis lainnya. **Kesimpulan:** Senyawa bioaktif pada propolis dapat berinteraksi terhadap reseptor TLR-4 melalui uji penambatan molekuler dan dapat berpotensi menjadi agen antiinflamasi terhadap TLR-4 yang dapat digunakan sebagai kandidat obat untuk terapi periodontitis. Namun, perlu dilakukan penelitian lebih lanjut untuk membuktikan sifat senyawa bioaktif pada propolis yang dapat bertindak sebagai agen antiinflamasi yang baik untuk terapi periodontitis.

.....**Background:** According to 2018 Basic Health Survey (Riskesdas) data, periodontitis is the second most frequent condition after dental caries, which reached a prevalence of 74.1% in Indonesia. Periodontitis is an inflammatory condition associated with the destruction of periodontal tissue. TLR-4, which recognizes gram-negative bacterial lipopolysaccharides (LPS), plays a crucial role in the immune response and inflammatory pathogenesis of periodontitis. Propolis is a natural product in the form of resin that has many biological activities, one of which is anti-inflammatory. **Purpose:** To investigate the molecular interactions of propolis compounds that have anti-inflammatory potential against TLR-4 in periodontitis therapy through molecular docking studies. **Methods:** In silico computational experimental study using Autodock Tools 1.5.6 and BIOVIA Discovery Studio Visualizer 2021 to test the interaction and binding affinity of propolis ligands towards the TLR-4 target receptor. The interaction results will be analyzed to assess the best conformation of a molecule and its binding affinity.

Molecular docking was performed by targeting 7 propolis compounds that have anti-inflammatory potential against TLR-4 as a receptor that plays a role in the inflammatory process. **Results:** There is a binding interaction between propolis ligands and TLR-4 receptor. Of the seven propolis ligands tested, the compound Adhyperforin had the best affinity compared to other propolis ligand. **Conclusions:** Bioactive compounds in propolis can interact with TLR-4 receptors through molecular docking tests and can potentially become anti-inflammatory agents against TLR-4 that can be used as drug candidates for periodontitis therapy. However, further research is needed to prove the nature of bioactive compounds in propolis that can act as good anti-inflammatory agents for periodontitis therapy.