

Studi Molecular Docking Interaksi Myosin dan Polisakarida untuk Prediksi Sifat Gel Protein Udang

The Study of Molecular Docking of Myosin and Polysaccharide Interactions to Predict Protein Gel Characteristics of Shrimp

Yulia Rachmawati^{1*}, Nadiyah Zuhroh¹

¹Program Studi Teknologi Rekayasa Pangan, Jurusan Teknologi Pertanian, Politeknik Negeri Jember

*Email Koresponden: yulia.rachmawati@polije.ac.id

Received : 2 November 2025 | Accepted : 12 November 2025 | Published : 12 November 2025

Kata Kunci	ABSTRAK
udang, myosin, molecular docking, gel protein, myofibrillar, polisakarida	Udang merupakan komoditas perikanan yang berpotensi diolah menjadi produk berbasis gel protein. Namun, gel protein udang diketahui cenderung rapuh sehingga diperlukan bahan aditif seperti polisakarida untuk memperbaiki struktur gel. Penelitian ini bertujuan mengevaluasi potensi lima polisakarida pangan lokal <i>glucomannan</i>, <i>xyloglucan</i>, <i>β-glucan</i>, <i>iota-carrageenan</i>, dan <i>pectin</i> dalam pembentukan gel protein udang secara <i>in silico</i>. Simulasi <i>molecular docking</i> dilakukan menggunakan aplikasi HEX 8.0.0 antara protein myosin homolog dari spesies udang dan masing-masing polisakarida, kemudian dianalisis dengan Discovery Studio Client 4.1. Hasil simulasi menunjukkan bahwa jenis, jumlah, dan jarak ikatan non-kovalen mempengaruhi kestabilan kompleks protein-polisakarida. Kompleks <i>myosin-ι-carrageenan</i> menunjukkan kestabilan tertinggi (E total -483,94 kkal/mol) dengan interaksi dominan berupa elektrostatis (<i>salt bridge</i> dan <i>π-anion</i>). Interaksi kompleks <i>myosin-xyloglucan</i> dan <i>myosin-pectin</i> masing-masing didominasi oleh ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik. <i>Myosin</i> dengan <i>glucomannan</i> dan <i>β-glucan</i> menunjukkan interaksi paling lemah melalui ikatan hidrogen. Secara keseluruhan, urutan kekuatan interaksi terhadap <i>myosin</i> adalah <i>ι-carrageenan</i> > <i>xyloglucan</i> > <i>pectin</i> > <i>glucomannan</i> > <i>β-glucan</i>. <i>ι-carrageenan</i> dan <i>xyloglucan</i> berpotensi menghasilkan gel protein udang yang bersifat padat dan lembut, <i>pectin</i> berpotensi menghasilkan gel protein udang yang padat dan rapat. <i>Glucomannan</i> dan <i>β-glucan</i> berpotensi menghasilkan gel protein udang yang kurang padat.
Keywords	ABSTRACT
<i>shrimp, myosin, molecular docking, gel protein, myofibrillar protein, polysaccharides</i>	<i>Shrimp is a fisheries commodity with great potential to be processed into protein gel-based products. However, shrimp protein gels are relatively brittle. Therefore, additives such as</i>

Copyright (c) 2025
Authors Yulia
Rachmawati, Nadiyah
Zuhroh



This work is licensed
under a [Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/).

polysaccharides are required to improve gel structure. This study aimed to evaluate the potential of five local food-derived polysaccharides—glucomannan, xyloglucan, β -glucan, iota-carrageenan, and pectin—in shrimp protein gel formation using an *in silico* approach. Molecular docking simulations were performed using HEX 8.0.0 between homologous shrimp myosin protein and each polysaccharide, and the resulting complexes were analyzed with Discovery Studio Client 4.1. The results showed that the type, number, and distance of non-covalent interactions influenced the stability of the protein–polysaccharide complexes. The myosin–*i*-carrageenan complex exhibited the highest stability ($E_{\text{total}} -483.94$ kcal/mol), dominated by electrostatic interactions (salt bridge and π -anion). The myosin–xyloglucan and myosin–pectin complexes were mainly stabilized by hydrogen bonds and hydrophobic interactions, respectively. Myosin interactions with glucomannan and β -glucan were the weakest, dominated by a few hydrogen bonds. Overall, the interaction strength followed the order *i*-carrageenan > xyloglucan > pectin > glucomannan > β -glucan. Iota-carrageenan and xyloglucan are predicted to produce compact and tender shrimp protein gels, pectin to form compact and firm gels, while glucomannan and β -glucan are expected to produce less compact gel structures.

1. PENDAHULUAN

Udang merupakan salah satu komoditas perikanan utama di Indonesia. Selain dipasarkan dalam bentuk segar, udang juga banyak diolah menjadi berbagai produk pangan guna meningkatkan nilai tambah dan diversifikasi produk. Salah satu bentuk olahan udang yang memiliki potensi besar untuk dikembangkan adalah produk berbasis gel protein (surimi udang), seperti bakso, otak-otak, dan sosis udang. Pembentukan gel pada produk surimi tergantung pada kemampuan protein myofibrillar, terutama *myosin*, dalam membentuk jaringan tiga dimensi.

Surimi udang secara alami dapat membentuk jaringan gel yang relatif stabil karena tingginya kandungan paramyosin dan kemampuan cross-linking, namun gel yang terbentuk cenderung rapuh (Yang et al. 2020). Evaluasi mutu surimi udang umumnya meliputi warna, *water holding capacity*, kekuatan gel, kekerasan, dan elastisitas. Sifat gel merupakan parameter utama yang secara langsung memengaruhi tekstur dan nilai komersial produk. Oleh karena itu, peningkatan kualitas gel surimi udang menjadi aspek yang sangat penting dalam pengembangan produk olahan berbasis protein udang. Berbagai zat aditif digunakan untuk meningkatkan sifat gel dalam formulasi produk surimi udang (Wang et al. 2024).

Salah satu zat aditif yang menjadi perhatian adalah polisakarida, yang diketahui dapat memengaruhi karakteristik gel melalui interaksi molekuler dengan protein. Bahan pangan lokal Indonesia memiliki potensi besar sebagai bahan aditif fungsional untuk memodifikasi struktur gel protein. Beberapa di antaranya adalah *glucomannan* dari umbi porang (*Amorphophallus muelleri*), *carrageenan* dari rumput laut (*Eucheuma denticulatum*), β -*glucan* dari jamur tiram (*Pleurotus ostreatus*), *pectin* dari apel malang (*Malus domestica*), dan *xyloglucan* dari biji asam jawa (*Tamarindus indica*). Setiap jenis polisakarida tersebut memiliki perbedaan komposisi monosakarida, tingkat substitusi, dan distribusi muatan yang unik, sehingga dapat memberikan efek fungsional yang berbeda terhadap sifat gel protein.

Beragam studi menunjukkan bahwa perbedaan struktur dan muatan polisakarida dapat memberikan efek fungsional yang bervariasi terhadap gel protein. Sebagai contoh, penambahan polisakarida okra meningkatkan kepadatan gel (Wang et al., 2024), *konjac glucomannan* berkontribusi pada peningkatan *water holding capacity* gel (Li et al., 2024), *carrageenan* dapat meningkatkan stabilitas emulsi protein dengan urutan κ -*carrageenan* > ι -*carrageenan* > λ -*carrageenan* > *chitosan* (Ren et al., 2024). Struktur dan muatan polisakarida menentukan kemampuannya dalam membentuk interaksi non-kovalen dengan protein seperti ikatan hidrogen, interaksi elektrostatik, dan interaksi hidrofobik (Cheng et al., 2025). Interaksi non-kovalen tersebut menjadi faktor penting dalam pembentukan jaringan gel protein.

Polisakarida sebagai zat aditif dalam gelasi protein dapat dikaji secara *in silico* yang merupakan pendekatan penting sebelum dilakukan eksperimen di laboratorium. Pendekatan *in silico* ini dilakukan dengan *molecular docking*, yaitu metode komputasi yang dapat memprediksi lokasi, jenis, dan kekuatan interaksi antara protein dan polisakarida. Metode ini merupakan evaluasi tahap awal interaksi molekuler, yang selanjutnya dapat dijadikan sebagai pertimbangan dalam formulasi zat aditif yang lebih efisien untuk produk gel protein.

Berdasarkan uraian di atas, penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi polisakarida dari bahan pangan lokal dalam gelasi protein udang secara *in silico*. Metode *molecular docking* digunakan untuk simulasi interaksi lima jenis polisakarida (*glucomannan*, *xyloglucan*, β -*glucan*, *iota-carrageenan*, dan *pectin*) dengan protein *myosin* spesies udang. Melalui studi ini, diharapkan perbedaan interaksi molekuler non-kovalen antara kelima polisakarida dengan *myosin* dapat diidentifikasi dan dievaluasi kekuatan interaksinya terhadap stabilitas kompleks *myosin*-polisakarida, sehingga dapat diprediksi pengaruhnya terhadap sifat gel protein udang.

2. METODE

2.1 Preparasi Struktur Myosin dan Polisakarida

Struktur protein myosin udang *Penaeus vannamei* (umum di Indonesia) belum dilaporkan pada literatur dan belum tersedia templat yang sesuai pada database. Sehingga model homolog disusun berdasarkan urutan asam amino myosin *Penaeus japonicus* (No. ADD70028.1) yang diunduh dari <https://www.ncbi.nlm.nih.gov>. Kesesuaian model homolog telah dievaluasi berdasarkan analisis struktur sekunder dan stereokimia, serta dinyatakan layak untuk studi *molecular docking* (Li et al. 2022). Struktur 3D lima jenis polisakarida yaitu *glucomannan* (CID: 24892726), *xyloglucan* (CID: 6444001), β -*glucan* (CID: 439262), *iota-carrageenan* (CID: 11966245), dan *pectin* (CID: 156594240) diunduh dari <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>. Struktur myosin dan polisakarida selanjutnya dipreparasi agar lebih sesuai untuk interaksi molekuler. Molekul air yang berikatan dengan myosin dihilangkan menggunakan aplikasi Discovery Studio Client 4.1. Energi polisakarida diminimalisir menggunakan Aplikasi PyRx virtual screening program Open Babel tool. Format file polisakarida diubah dari SDF menjadi PDB menggunakan Aplikasi PyRx.

2.2 Molecular Docking

Simulasi interaksi molekuler antara protein (myosin) dan ligan (polisakarida) dilakukan dengan menggunakan aplikasi *molecular docking* HEX 8.0.0. Hasil docking kemudian divisualisasikan dan dianalisis melalui aplikasi Discovery Studio Client 4.1. Nilai energi ikatan, jenis, jumlah, dan jarak interaksi non-kovalen antara polisakarida dengan residu-residu asam

amino yang terlibat dalam interaksi dievaluasi untuk mengetahui kekuatan interaksi kompleks myosin-polisakarida yang digunakan sebagai dasar prediksi sifat gel protein udang

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil visualisasi 3D molecular docking antara protein dan polisakarida ditunjukkan pada Gambar 1. Polisakarida masuk ke dalam situs aktif di rongga myosin dan berinteraksi dengan residu asam amino pada myosin. Interaksi polisakarida dengan residu asam amino pada myosin dapat mengganggu konformasi myosin, yang mendorong terbentuknya agregat sehingga membantu meningkatkan kemampuan myosin membentuk gel. Struktur sekunder utama myosin adalah α -helix. Penambahan polisakarida diketahui dapat menurunkan kandungan struktur α -helix dan meningkatkan proporsi struktur β -sheet pada myosin. Perubahan terjadi akibat interaksi antara gugus hidroksil polisakarida dengan rantai polipeptida, yang mengganggu ikatan hidrogen internal yang menstabilkan struktur α -helix. Interaksi ini memicu restrukturisasi protein yang selanjutnya berkontribusi terhadap sifat pembentukan gel (Li et al. 2024). Interaksi non-kovalen utama pada interaksi antara protein dan polisakarida mencakup ikatan hidrogen, hambatan sterik, elektrostatik, dan interaksi hidrofobik (Babu et al. 2024).

Interaksi

Struktur Ligan-Protein (3D)

Interaksi Ligan dengan Residu Asam Amino (2D)

(a)

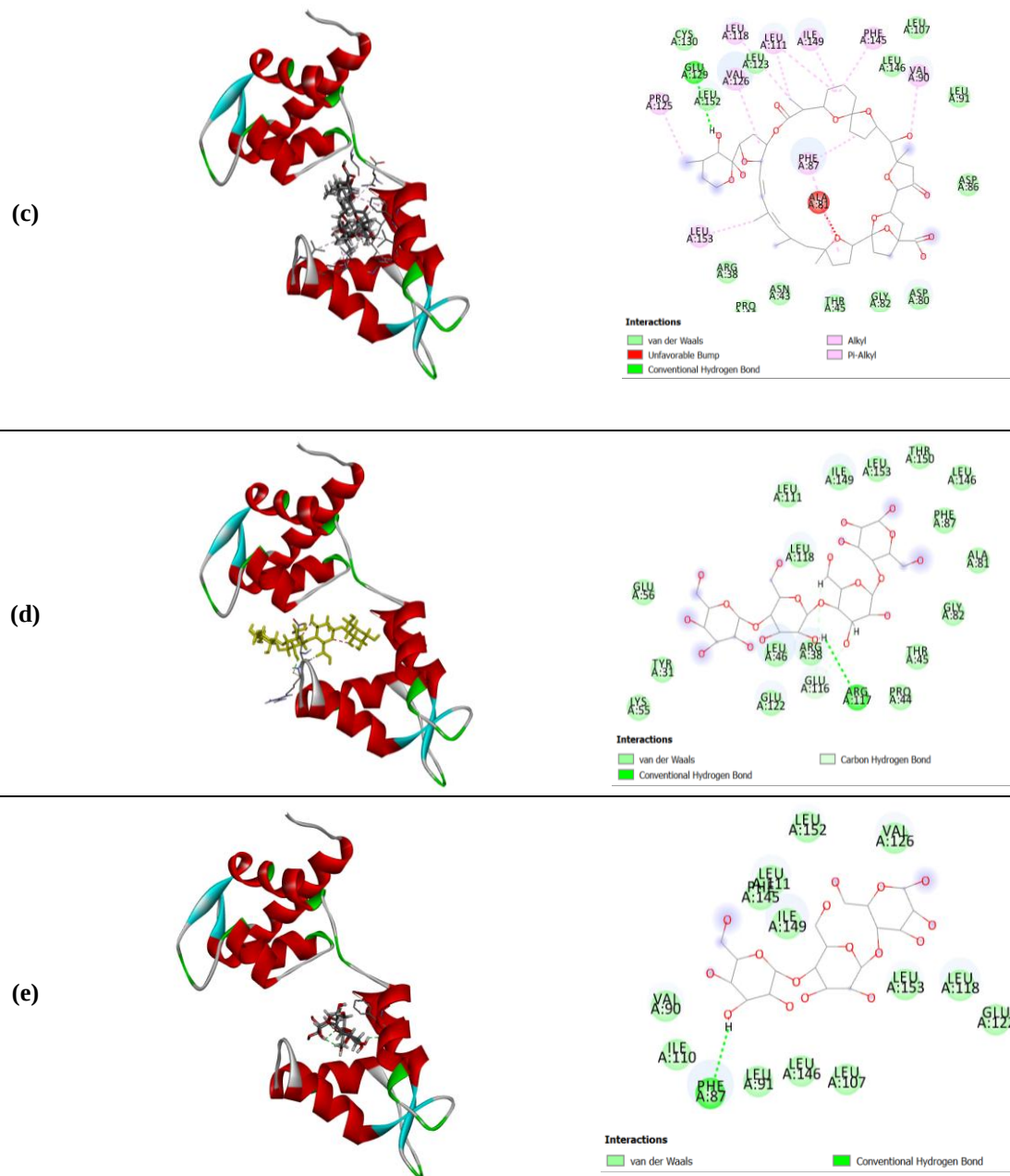
Interactions

- van der Waals
- Salt Bridge
- Conventional Hydrogen Bond
- Unfavorable Negative-Negative
- Pi-Anion

(b)

Interactions

- van der Waals
- Unfavorable Bump
- Conventional Hydrogen Bond
- Carbon Hydrogen Bond



Gambar 1. Molecular docking antara myosin dan polisakarida: (a) myosin-*i-carrageenan*; (b) myosin-*xyloglucan*; (c) myosin-*pectin*; (d) myosin-*glucomannan*; (e) myosin- β -*glucan*

Visualisasi 2D pada Gambar 1 merepresentasikan interaksi yang terjadi, dimana garis putus-putus hijau menunjukkan ikatan hidrogen dengan atom elektronegatif seperti O atau N, sedangkan garis putus-putus hijau muda menunjukkan ikatan *carbon hydrogen*. Garis ungu muda menandakan interaksi π -alkil antara cincin aromatik dan gugus alkil, sementara garis oranye menggambarkan interaksi antara sistem π -anion. Garis putus-putus ungu menunjukkan interaksi π - σ antara orbital π dan ikatan σ . Asam amino berwarna hijau muda tanpa garis interaksi menggambarkan interaksi van der waals yang lemah namun penting untuk stabilisasi kompleks. Selain itu, halo biru di sekitar residu menandakan luas permukaan yang dapat diakses

oleh pelarut (*solvent accessible surface*), yang menggambarkan sejauh mana residu tersebut terekspos terhadap lingkungan sekitarnya (Vaidyanathan et al. 2023).

Nilai energi ikatan kompleks protein-polisakarida hasil simulasi *molecular docking* disajikan pada Tabel 1 yang seluruhnya bernilai negatif, artinya interaksi berjalan secara spontan (Wang et al. 2024). Berdasarkan parameter interaksi yang terjadi dari hasil *molecular docking*, nilai energi yang paling rendah menandakan struktur yang paling stabil (Li et al. 2022). Polisakarida yang berinteraksi paling kuat dengan myosin adalah *i-carrageenan*. Jika diurutkan dari yang paling kuat adalah *i-carrageenan* > xyloglucan > pectin > glucomannan > β -glucan. Energi ikatan ditentukan oleh jenis dan jumlah interaksi non-kovalen yang terlibat pada kompleks protein-polisakarida.

Tabel 1. Energi ikatan (E total) kompleks protein-polisakarida

Polisakarida	Energi ikatan (kkal/mol)
β -glucan	- 294,07
glucomannan	- 327,40
pectin	- 402,24
xyloglucan	- 458,16
<i>i-carrageenan</i>	- 483,94

Jenis interaksi non-kovalen *myosin* dan *i-carrageenan* disajikan pada Tabel 2. *Conventional Hydrogen bond* terjadi antara Glu116 dengan atom oksigen pada gugus hidroksil *i-carrageenan*. Jarak interaksi ini sebesar 2,15 Å yang lebih pendek dibanding *conventional hydrogen bond* pada keempat polisakarida lain, artinya ikatan hidrogen pada *myosin* dan *i-carrageenan* lebih kuat. Interaksi *salt bridge* terjadi antara Lys96 dengan gugus sulfat yang bermuatan negatif pada *i-carrageenan*. *Salt bridge* merupakan gaya tarik elektrostatis yang diketahui dapat memperkuat interaksi protein dan ligan (Yan et al. 2023). Selain itu, interaksi elektrostatis juga terjadi antara gugus aromatik Phe87 dengan muatan negatif pada gugus sulfat *i-carrageenan*. Meskipun jaraknya relatif lebih panjang (4,62 Å), interaksi ini berkontribusi terhadap kestabilan kompleks protein-polisakarida. Secara keseluruhan, ketiga jenis interaksi non-kovalen yang teridentifikasi memberikan kontribusi penting terhadap kestabilan kompleks *myosin-i-carrageenan*, dengan interaksi elektrostatis sebagai faktor dominan.

Semakin banyak interaksi non-kovalen yang dapat menstabilkan kompleks protein-polisakarida, maka semakin besar peluang terbentuknya jaringan gel yang kokoh. Disamping itu, *i-carrageenan* memiliki kemampuan yang tinggi dalam mengikat air karena strukturnya kaya akan gugus hidroksil. Gugus-gugus hidroksil ini dapat membentuk ikatan hidrogen dengan molekul air, sehingga mengurangi pergerakan air bebas dalam sistem (Kalsi et al. 2025). Hal ini dapat membuat struktur gel menjadi padat dengan *moisture* dalam jaringan gel. *Moisture* dalam jaringan gel *myofibrillar protein-i-carrageenan* dapat meningkatkan kelembutan gel (Li et al. 2022).

Tabel 2. Interaksi Non-Kovalen Protein *Myosin* dengan *i-Carrageenan*

Jenis interaksi non kovalen	Jarak (Å)	Residu asam amino yang terlibat
<i>Conventional hydrogen bond</i>	2,15	GLU116
<i>Electrostatic (salt bridge) dan hydrogen bond</i>	2,90	LYS96
<i>Electrostatic (π-anion)</i>	4,62	PHE87

Interaksi non-kovalen antara myosin dengan keempat polisakarida lain yaitu *xyloglucan*, *pectin*, *glucomannan*, dan β -*glucan* disajikan pada Tabel 3. Interaksi yang dominan pada kompleks *myosin-xyloglucan* adalah ikatan hidrogen. Terdapat total 8 ikatan hidrogen, yaitu *conventional hydrogen bond* dan *carbon hydrogen bond* masing-masing sebanyak 3 dan 5 ikatan. *Carbon hydrogen bond* merupakan ikatan hidrogen yang lemah dimana atom hidrogen yang terikat pada karbon berinteraksi dengan atom elektronegatif, sebagai contoh atom H pada ikatan C-H *xyloglucan* berikatan dengan atom O/N pada karbonil/amida residu Try20. Meskipun ikatan ini lebih lemah dibanding ikatan *conventional hydrogen bond*, namun bila interaksi ini jumlahnya banyak maka dapat menyokong stabilitas struktur (Steinert et al. 2022).

Jarak *conventional hydrogen bond* berada pada rentang 2,38-2,62 Å dengan rata-rata sebesar 2,52 Å, sedangkan *carbon hydrogen bond* pada rentang 1,76-3,01 Å dengan rata-rata 2,69 Å. Jarak ikatan tersebut lebih panjang dibandingkan ikatan hidrogen pada kompleks *myosin-i-carrageenan*. Jenis dan jarak interaksi non-kovalen tersebut memberikan nilai E total -458,16 kkal/mol. Nilai energi ikatan kompleks *myosin-xyloglucan* ini lebih tinggi dari *myosin-i-carrageenan* (E total -483,94 kkal/mol). *Xyloglucan* juga kaya akan gugus hidroksil yang mampu mengikat molekul air dalam jaringan gel. Dengan demikian, kompleks ini berpotensi membentuk gel yang lembut namun memiliki kestabilan gel yang relatif lebih rendah dibanding kompleks *myosin-i-carrageenan*.

Tabel 3. Interaksi Non-Kovalen Protein Myosin dengan Xyloglucan, Pectin, Glucomannan, dan β -glucan

Polisakarida	Jenis interaksi non kovalen	Jumlah	Jarak (Å)	Residu asam amino yang terlibat
<i>Xyloglucan</i>	<i>Conventional Hydrogen Bond</i>	3	2,38-2,62	ARG58, GLU116, ARG117
	<i>Carbon Hydrogen Bond</i>	5	1,76-3,01	TYR20, ASN43, ARG38, ASN41, ASN41
<i>Pectin</i>	<i>Conventional Hydrogen Bond</i>	1	3,05	GLU129
	<i>Hydrophobic (Alkyl)</i>	8	3,60-5,45	LEU111, VAL126, ILE149, VAL90, LEU111, LEU118, LEU153, PRO125
	<i>Hydrophobic (π-Alkyl)</i>	3	3,73-5,33	PHE87, PHE87, PHE145
<i>Glucomannan</i>	<i>Conventional Hydrogen Bond</i>	1	2,37	ARG117
	<i>Carbon Hydrogen Bond</i>	2	2,75-2,97	GLU116, GLU116
β - <i>glucan</i>	<i>Conventional Hydrogen Bond</i>	1	2,52	PHE87

Pectin membentuk satu *conventional hydrogen bond* dengan residu Glu129. Sementara itu, interaksi hidrofobik mendominasi dengan jumlah total 11, hidrofobik alkil dan hidrofobik π -alkil masing-masing sebanyak 8 dan 3 interaksi. Interaksi hidrofobik muncul ketika gugus non-polar pada protein dan polisakarida saling mendekat, menghindari kontak dengan air (Li, S. et al. 2024). Gugus-gugus non-polar cenderung “terdorong” untuk berkumpul bersama sehingga sebagian molekul air yang membentuk struktur teratur disekitarnya terlepas ke fase bebas, artinya air dapat bergerak bebas (entropi meningkat). Karena secara alami sistem cenderung menuju ke keadaan dengan entropi yang lebih tinggi, maka proses penggabungan

gugus non-polar beserta pelepasan sebagian air menjadi gaya pendorong utama terjadinya pemisahan fase, yang berkontribusi terhadap stabilisasi kompleks (Ramos et al 2023).

Interaksi hidrofobik berperan penting dalam pembentukan jaringan gel yang kuat dan padat (Wang et al. 2024). Interaksi hidrofobik dapat mendorong agregasi protein myosin dan menyebabkan penyempitan saluran air dalam struktur gel yang pada akhirnya membentuk jaringan gel tiga dimensi yang lebih padat dengan pori-pori yang lebih kecil. Struktur yang lebih padat dan pori kecil ini dapat meningkatkan *water holding capacity*. Yu (2025) melaporkan interaksi *pectin* dan *myofibrillar protein* meningkatkan secara signifikan *water holding capacity* (33.8 %) dan karakteristik tekstur (kekerasan 1044 % dan elastisitas 31.5 %) dibandingkan kontrol.

Jarak interaksi hidrofobik pada kompleks *myosin-pectin* berada pada rentang 3,05-5,45 Å. Jarak rata-rata *hydrophobic alkyl* dan π -*alkyl* masing-masing sebesar 4,52 Å dan 4,67 Å. Jarak interaksi tersebut lebih panjang jika dibandingkan dengan jarak interaksi dominan pada kompleks *myosin-i-carrageenan* dan *myosin-xyloglucan*. Jenis dan jarak interaksi tersebut memberikan nilai E total -402,24 kkal/mol, yang lebih tinggi dari nilai E total kompleks *myosin-i-carrageenan* dan *myosin-xyloglucan*. Kompleks *myosin-pectin* berpotensi membentuk gel yang padat dan rapat, namun dengan kestabilan yang relatif lebih rendah dari kompleks *myosin-i-carrageenan* dan *myosin-xyloglucan*.

Glucomannan berinteraksi dengan *myosin* melalui tiga ikatan hidrogen, yaitu satu *conventional hydrogen bond* dengan residu Arg117 berjarak 2,37 Å dan dua *carbon hydrogen bond* dengan residu Glu116 berjarak 2,75-2,97 Å. Jenis dan jumlah interaksi pada kompleks *myosin-glucomannan* lebih sedikit dibandingkan interaksi *myosin* dengan *i-carrageenan*, *xyloglucan*, dan *pectin*, meskipun memiliki jarak interaksi yang cukup pendek. Kondisi ini mengakibatkan interaksi pada *myosin* dan *glucomannan* lebih lemah dan menghasilkan nilai E total nilai E total -327,40 kkal/mol yang lebih tinggi dari ketiga polisakarida sebelumnya. Interaksi yang lemah tersebut berpotensi menghasilkan jaringan gel yang lemah, kurang padat, oleh karena itu kontribusi *glucomannan* terhadap struktur gel kemungkinan bersifat fisik, yaitu melalui mekanisme pengisian ruang (*physical filling*) yang mendukung kekuatan mekanis gel melalui keberadaan dan distribusi massa polisakarida, tanpa banyak bergantung pada interaksi kimiawi yang dengan protein (Li et al. 2024).

β -*glucan* berinteraksi dengan *myosin* melalui satu ikatan hidrogen, yaitu *conventional hydrogen bond* (2,52 Å) dengan residu Phe87. Jenis dan jumlah interaksi non-kovalen pada kompleks ini paling sedikit sehingga memberikan nilai energi total yang paling tinggi (E total = -294,07 kkal/mol). Dengan demikian, kompleks *myosin- β -glucan* paling lemah dalam membentuk jaringan gel, yang berpotensi menghasilkan gel protein yang kurang padat jika dibandingkan gel protein dari kompleks *myosin-polisakarida* lain yang diuji pada penelitian ini (*myosin - i-carrageenan*, *xyloglucan*, *pectin*, dan *glucomannan*).

4. KESIMPULAN

Hasil studi *molecular docking* menunjukkan bahwa kelima polisakarida yang diuji (*i-carrageenan*, *xyloglucan*, *pectin*, *glucomannan*, dan β -*glucan*) memiliki jenis, jumlah, dan jarak interaksi non-kovalen yang berbeda dengan protein *myosin*. Urutan kekuatan interaksi polisakarida terhadap *myosin* adalah *i-carrageenan* > *xyloglucan* > *pectin* > *glucomannan* > β -*glucan*. Di antara kelima polisakarida tersebut, *i-carrageenan* membentuk kompleks protein-polisakarida yang paling stabil (-483,94 kkal/mol), didukung oleh interaksi kuat yaitu *electrostatic* (*salt bridge* dan π -*anion*) sebagai interaksi dominan dan ikatan hidrogen. Kompleks *myosin-i-carrageenan* berpotensi menghasilkan gel protein yang bersifat padat dan

lembut. Kompleks *myosin-xyloglucan* dan *myosin-pectin* juga menunjukkan interaksi yang cukup kuat, meskipun kestabilannya lebih rendah dibandingkan kompleks *myosin- ι -carrageenan*. Interaksi pada kompleks *myosin-xyloglucan* didominasi oleh ikatan hidrogen dan berpotensi menghasilkan gel yang padat dan lembut. Sedangkan interaksi pada kompleks *myosin-pectin* didominasi oleh hidrofobik yang berpotensi membentuk gel protein yang bersifat padat dan rapat. Sementara itu, *glucomannan* dan β -*glucan* menunjukkan interaksi paling lemah terhadap *myosin*, dengan jenis dan jumlah ikatan non-kovalen yang lebih sedikit dan nilai energi ikatan lebih tinggi, sehingga lemah dalam menghasilkan jaringan gel dan berpotensi menghasilkan gel yang kurang padat. *Glucomannan* dan β -*glucan* kemungkinan berkontribusi secara fisik (*physical filling*) terhadap gel protein.

DAFTAR PUSTAKA

- Babu, Ashley, Rafeeya Shams, Kshirod Kumar, and Ayaz Mukarram. 2024. "Protein-Polysaccharide Complexes and Conjugates : Structural Modifications and Interactions under Diverse Treatments." 18(November). doi:10.1016/j.jafr.2024.101510.
- Havenith, Martina. 2023. "Protein Complexes between Liquid – Liquid and Liquid – Solid Phase Separation †." 28063–69. doi:10.1039/d3cp03299j.
- Kalsi, Ginisha, Udipta Hazarika, Luna Dutta, Baruah Premila, and L. Bordoloi Moloya. 2025. "Comprehensive Review of Carrageenan ' s Multifaceted Role in Health and Food Systems." *Discover Food*. doi:10.1007/s44187-025-00405-7.
- Li, Deyang, Na Li, Yefan Wang, Kexin Zhang, Zhifeng Tan, Huilin Liu, Xiaoyang Liu, Qiong Wu, and Dayong Zhou. 2024. "Food Hydrocolloids Effect of Konjac Glucomannan on Gelling and Digestive Properties of Myofibrillar Protein in *Litopenaeus Vannamei* Based on Molecular Docking." 149(November 2023). doi:10.1016/j.foodhyd.2023.109595.
- Li, Shuang, Songyi Lin, Pengfei Jiang, Zhijie Bao, Xueqing He, and Na Sun. 2023. "Contribution of κ - ι -Carrageenan on the Gelling Properties of Shrimp Myofibrillar Protein and Their Interaction Mechanism Exploration." *Journal of the Science of Food and Agriculture* 103(2):524–33. doi:10.1002/jsfa.12163.
- Li, Shuang, Shuo Wang, Songyi Lin, Na Sun, Pengfei Jiang, Zhijie Bao, and Xixin Qian. 2024. "The Interaction Mechanism of Different Ionic Polysaccharides with Myofibrillar Protein and Its Contribution to the Heat-Induced Gels." (October 2023):1613–28. doi:10.1002/fft2.403.
- Steinert, Ryan M., Chandana Kasireddy, Micah E. Heikes, and Katie R. Mitchell-Koch. 2022. "Newly Identified C–H...O Hydrogen Bond in Histidine." *Physical Chemistry Chemical Physics* 24(32):19233–51. doi:10.1039/D2CP02048C.
- Vaidyanathan, Rajagopalan, Sangeetha Murugan Sreedevi, Keerthiga Ravichandran, Seba Merin Vinod, Yogesh Hari Krishnan, Lalith Kumar Babu, Parimala Selvan Parthiban, Lavanya Baskar, Tamizhdurai Perumal, Vasanthi Rajaraman, Gopalakrishnan Arumugam, Kumaran Rajendran, and Vanjinathan Mahalingam. 2023. "Molecular Docking Approach on the Binding Stability of Derivatives of Phenolic Acids (DPAs) with Human Serum Albumin (HSA): Hydrogen-Bonding versus Hydrophobic Interactions or Combined Influences ? CA." *JCIS Open* 12(September):100096. doi:10.1016/j.jciso.2023.100096.
- Wang, Xin, Mengzhe Li, Tong Shi, Abdul Razak, Li Yuan, Wengang Jin, and Ruichang Gao. 2024. "Current Research in Food Science Enhancement of the Gelling Properties of *Aristichthys Nobilis* : Insights into Intermolecular Interactions between Okra Polysaccharide and Myofibrillar Protein." *Current Research in Food Science* 9(July):100814. doi:10.1016/j.crfs.2024.100814.
- Wang, Ziyang, Jiehui Feng, Qianqian Li, Ru Jia, Tao Huang, Huamao Wei, and Wenge Yang. 2024. "Effect of Sodium Alginate and Calcium Chloride on the Physicochemical Characteristics of Shrimp (*Penaeus Vannamei*) Surimi Gels ." *Journal of Ocean University of China* 23(6):1645–54. doi:10.1007/s11802-024-5866-8.

-
- Yan, Jia-Nan, Bin Nie, Zhu-Jun Zhang, Ling-Yi Gao, Bin Lai, Ce Wang, Li-Chao Zhang, and Hai-Tao Wu. 2023. "Monovalent Salt and PH-Stimulated Gelation of Scallop (*Patinopecten Yessoensis*) Male Gonad Hydrolysates/ κ -Carrageenan." *Foods* 12(19).
- Yang, Yan, Xiangyu Liu, Yong Xue, Changhu Xue, and Yuanhui Zhao. 2020. "The Process of Heat-Induced Gelation in *Litopenaeus Vannamei*." *Food Hydrocolloids* 98:105260. doi:<https://doi.org/10.1016/j.foodhyd.2019.105260>.
- Yu, Han, and Jian Zhang. 2025. "Innovative Insights into the Interaction Dynamics and Gel Properties of Myofibrillar Protein with Structurally Diverse Pectin." *Carbohydrate Polymers* 358:123519. doi:<https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2025.123519>.