

ABSTRACT

GnRH Variations and *Molecular docking* GnRH - GnRHr of Local Siluriformes and Anabantiformes Fish, Central Java - DIY

GnRH analogs show promising potential in various fields, including hormone production for induced spawning to enhance fish seed production. The use of GnRH in local Indonesian Siluriformes and Anabantiformes fish species has not been widely explored. Indonesian local fish resources have great potential considering their rapid population growth and cultivation. This research aims to characterize the GnRH gene in local Indonesian Siluriformes and Anabantiformes fish and determine candidate GnRH based on local Indonesian fish. One way to determine the affinity and binding ability of a compound or protein to a target protein is through *in-silico* methods such as *molecular docking*. The research began with the exploration of GnRH in local Indonesian fish, namely Baung (*Hemibagrus nemurus*), Keting (*Mystus* sp.), Betik (*Anabas testudineus*), and Gurami (*Osphronemus goramy*), for GnRH isolation and characterization. The GnRH sequence results were compiled with GnRH data from *databases* for *in-silico* testing to identify the best GnRH candidates. Prepro GnRH consists of several main structural elements such as *signal peptide*, GnRH *decapeptide*, *cleavage site*, and GnRH-associated peptide (GAP). The GnRH sequences are highly conserved, with GnRH-1 in Siluriformes fish consisting of the amino acid sequence QHWSHGLNPG, GnRH-1 in Anabantiformes fish (QHWSYGLSPG), and GnRH-2 in Siluriformes and Anabantiformes fish (QHWSHGWYPG). The lowest binding energy results for all receptors (R1CM, R2CG, R2CM, R1TL, R2BS, and R2CA) were obtained for GnRH-2 ligands in Siluriformes and Anabantiformes with binding affinity values of -949.8 kcal/mol, -1039.8 kcal/mol, -964.6 kcal/mol, -984.5 kcal/mol, -982.8 kcal/mol, and -1033.99 kcal/mol, respectively. The number of GnRH-2 residues interacting at the active site of GnRHr ranged from 10-30 bonds. *Hydrogen bonds* in the GnRH-2 interaction had higher values compared to other docking pairs, particularly in the interaction of GnRH-2 with R1TL (14 bonds) and R2BS (16 bonds). The results of the non-bonded contact docking assessment of GnRH with GnRHr showed that GnRH-2 dominated the number of non-bonded contact interactions with 96-204 interactions, especially in the receptors R2CG, R2CM, R1TL, and R2BS. From the *in-silico* test results, it can be concluded that GnRH-2 in Siluriformes and Anabantiformes fish can be a candidate for GnRH based on local Indonesian fish.

Keywords: GnRH, local fish, *molecular docking*

INTISARI

Variasi GnRH dan *Molecular docking* GnRH - GnRHr Ikan Siluriformes dan Anabantiformes Lokal Jawa Tengah - DIY

GnRH analog menunjukkan potensi yang menjanjikan diberbagai bidang termasuk produksi hormon induksi pemijahan untuk peningkatan produksi benih ikan. Penggunaan GnRH pada spesies ikan Siluriformes dan Anabantiformes lokal Indonesia masih belum banyak dieksplorasi. Sumberdaya ikan lokal Indonesia memiliki potensi yang besar mengingat populasi dan perkembangan budidayanya yang pesat. Penelitian ini bertujuan untuk mengkarakterisasi gen GnRH ikan Siluriformes dan Anabantiformes lokal Indonesia dan menentukan kandidat GnRH berbasis ikan lokal Indonesia. Salah satu cara untuk mengetahui afinitas dan kemampuan pengikatan suatu senyawa atau protein terhadap protein target adalah dengan metode *in-silico* yaitu *molecular docking*. Penelitian diawali dengan melakukan eksplorasi GnRH ikan lokal Indonesia yaitu Ikan Baung (*Hemibagrus nemurus*), Keting (*Mystus* sp.), Betik (*Anabas testudineus*) dan Gurami (*Osphronemus goramy*) untuk dilakukan isolasi dan karakterisasi GnRH. Hasil sekuen GnRH dikompilasikan dengan data GnRH dari *database* untuk dilakukan uji *in-silico* untuk mencari tahu kandidat GnRH terbaik. Prepro GnRH terdiri dari beberapa elemen struktural utama seperti *signal peptide*, decapeptida GnRH, *cleavage site* dan GnRH associated peptide (GAP). Sekuen GnRH sangat terkonservasi dengan GnRH-1 ikan Siluriformes terdiri dari sekuen asam amino QHWSHGLNPG, GnRH-1 ikan Anabantiformes (QHWSYGLSPG) dan GnRH-2 ikan Siluriformes dan Anabantiformes (QHWSHGWYPG). Hasil energi ikatan terendah untuk seluruh reseptor (R1CM, R2CG, R2CM, R1TL, R2BS dan R2CA) diperoleh ligan GnRH-2 Siluriformes dan Anabantiformes dengan nilai afinitas ikatan masing-masing (-949,8 kcal/mol, -1039,8 kcal/mol, -964,6 kcal/mol, -984,5 kcal/mol, -982,8 kcal/mol dan -1033,99 kcal/mol). Jumlah residu GnRH-2 yang berinteraksi pada situs aktif GnRHr berkisar antara 10-30 ikatan. Ikatan hidrogen pada interaksi GnRH-2 memiliki nilai yang lebih tinggi dibandingkan dengan pasangan docking lainnya, terutama interaksi GnRH-2 dengan R1TL (14 ikatan) dan R2BS (16 ikatan). Hasil penilaian *non-bonded contact* docking GnRH dengan GnRhr menunjukkan bahwa GnRH-2 mendominasi jumlah interaksi *non-bonded contact* sebanyak 96-204 interaksi, terutama pada reseptor R2CG, R2CM, R1TL dan R2BS. Dari hasil uji *in-silico* dapat disimpulkan bahwa GnRH-2 ikan Siluriformes dan Anabantiformes dapat menjadi kandidat GnRH berbasis ikan lokal Indonesia.

Kata kunci: GnRH, ikan lokal, *molecular docking*