

ABSTRAK

Diabetes melitus tipe 2 disebabkan hilangnya sekresi insulin oleh sel beta pankreas secara progresif. Salah satu obat antidiabetik untuk mengatasi DM tipe 2 yaitu dengan penghambatan dipeptidil peptidase IV (DPP-IV). Enzim DPP-IV berperan dalam memecah inkretin sehingga menghambat stimulasi sekresi insulin. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui interaksi kaempferol dalam menstabilkan struktur dari enzim DPP-IV dengan penambatan molekuler dan dinamika molekuler pada suhu tubuh selama 15 ns pada 3 pose dengan menggunakan YASARA-*Structure* versi 22.8.22. Terdapat beberapa parameter yang digunakan pada penelitian ini yaitu nilai RMSD *backbone*, *ligand move* dan RMSF $\leq 2,000 \text{ \AA}$. Hasil dari penelitian ini menunjukkan ligan kaempferol membentuk kompleks yang tidak stabil dengan nilai Δ RMSD atom-atom *backbone* pada pose 1, 2 dan 3 sebesar 0,519 \AA , 0,691 \AA , dan 0,654 \AA secara berturut-turut dan nilai dari Δ RMSD *Ligand Move* DPP-IV yang diperoleh pada pose 1, 2 dan 3 secara berturut-turut sebesar 4,673 \AA , 14,677 \AA dan 3,714 \AA . Nilai RMSF pada beberapa residu sisi aktif yaitu Ser630, His740, Asn710, Trp629 dan Arg560 memiliki nilai RMSF $< 2,000 \text{ \AA}$.

Kata kunci: diabetes melitus tipe 2, dipeptidil peptidase IV, kaempferol, penambatan molekul, dinamika molekul

ABSTRACT

Type 2 diabetes mellitus is caused by a progressive loss of insulin secretion by pancreatic beta cells. One of the antidiabetic drugs to treat type 2 DM is by inhibiting dipeptidyl peptidase IV (DPP-IV). The DPP-IV enzyme plays a role in breaking down incretin thereby inhibiting the stimulation of insulin secretion. This study aims to determine the interaction of kaempferol in stabilizing the structure of the DPP-IV enzyme by molecular anchoring and molecular dynamics at body temperature for 15 ns in 3 poses using YASARA-Structure version 22.8.22. There are several parameters used in this study, namely the value of RMSD backbone, ligand move and RMSF $\leq 2,000 \text{ \AA}$. The results of this study showed that the kaempferol ligand formed an unstable complex with Δ RMSD values of the backbone atoms in poses 1, 2 and 3 of 0.519 \AA , 0.691 \AA and 0.654 \AA respectively and the values of Δ RMSD Ligand Move DPP- The IV obtained in poses 1, 2 and 3 were 4.673 \AA , 14.677 \AA and 3.714 \AA respectively. The RMSF values for several active site residues, namely Ser630, His740, Asn710, Trp629 and Arg560, have an RMSF value of $< 2,000 \text{ \AA}$.

Keywords: *type 2 diabetes mellitus, dipeptidyl peptidase IV, kaempferol, molecular docking, molecular dynamics*

