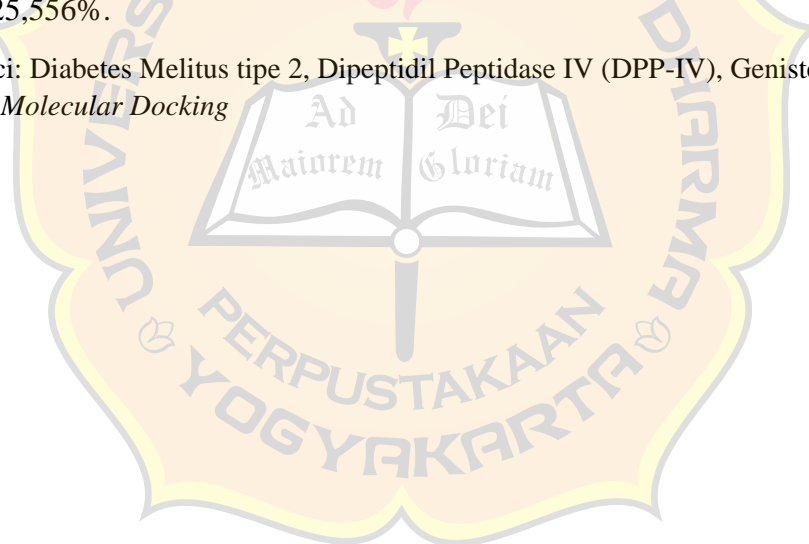


ABSTRAK

Diabetes melitus adalah gangguan metabolik yang ditandai dengan hiperglikemia. Pengembangan dan eksplorasi obat diabetes terus berkembang dari waktu ke waktu. Metode *molecular docking* dan dinamika molekuler merupakan salah satu metode yang *cost-efficient* dalam pengembangan obat. Penelitian ini bertujuan mengetahui interaksi genistein dalam menstabilkan struktur dari enzim DPP-IV dengan penambatan molekuler dan dinamika molekuler pada suhu tubuh selama 50 ns menggunakan YASARA-Structure versi 21.12.19. Parameter yang digunakan pada penelitian ini adalah *Root Mean Squared Deviation (RMSD) backbone* dan *ligand move*, *Root Mean Square Fluctuation (RMSF)* dan *Molecular Mechanism with Poisson-Boltzman Surface Area Solvation (MM/PBSA)*. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa kompleks genistein dengan DPP-IV tidak stabil. Posisi genistein pada kantong ikatan DPP-IV terdapat *pocket S1* dan *pocket S3*. Interaksi yang dominan terjadi adalah interaksi ikatan aromatik *face-to-face* dengan Tyr547. Frekuensi terjadinya interaksi ikatan aromatik *face-to-face* dengan Tyr547 selama simulasi 50 ns sebesar 25,556%.

Kata kunci: Diabetes Melitus tipe 2, Dipeptidil Peptidase IV (DPP-IV), Genistein, Dinamika Molekul, *Molecular Docking*



ABSTRACT

Diabetes mellitus is a metabolic disorder characterized by hyperglycemia. The development and exploration of diabetes drugs continues to evolve over time. Molecular docking and molecular dynamics are one of the cost-efficient methods in drug development. This study aims to investigate the interaction of genistein in stabilizing the structure of the enzyme DPP-IV with molecular docking and molecular dynamics at body temperature for 50 ns using Yasara-Structure version 21.12.19. The parameters used in this study are Root Mean Squared Deviation (RMSD) backbone and ligand move, Root Mean Square Fluctuation (RMSF) and molecular Mechanism with Poisson-Boltzman Surface Area Solvation 9MM/PBSA). The result of this study show that the genistein complex with DPP-IV is not stable. The position of genistein in the DPP-IV binding pocket is in pocket S1 and pocket S3. The dominant interaction occurs is aromatic face-to-face bonding with Tyr543. The Frequency of aromatic face-to-face with Tyr547 during the 50 ns simulation is 25,556%.

Keywords: Diabetes mellitus type 2, Dipeptidyl Peptidase IV (DPP-IV), Genistein, Molecular Docking, Molecular Dynamics

