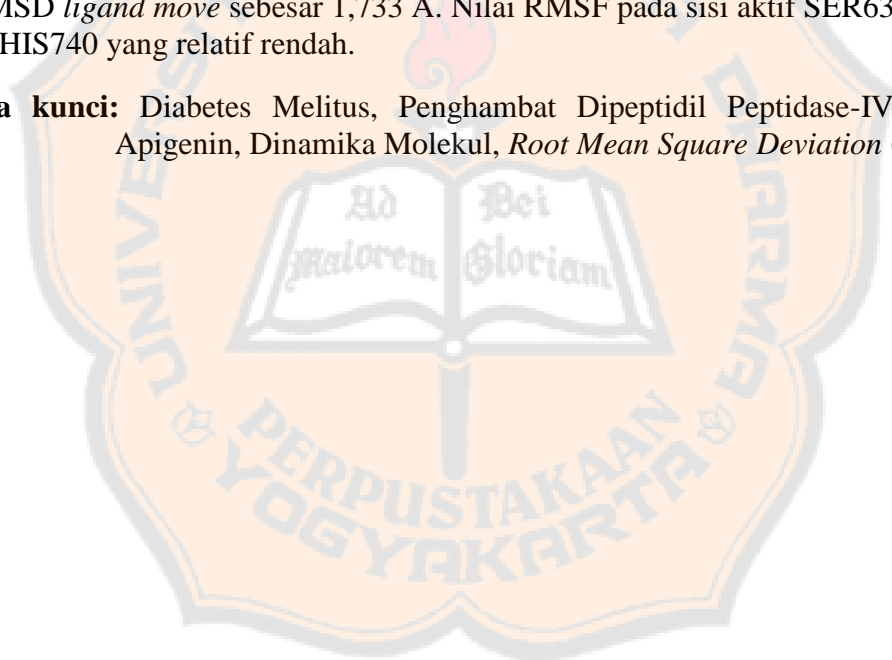


ABSTRAK

Diabetes melitus (DM) merupakan kondisi peningkatan kadar glukosa pada darah karena kelainan sekresi insulin atau kerja insulin. Tipe diabetes dengan jumlah penyandang diabetes terbanyak yaitu pada diabetes tipe 2, terjadi karena hilangnya sekresi insulin sel beta pankreas yang adekuat. Penghambat dipeptidil peptidase-IV (DPP-IV) merupakan salah satu terapi yang bisa diberikan kepada pasien diabetes melitus tipe 2. Senyawa flavonoid juga banyak digunakan untuk antidiabetes seperti apigenin, apigenin diketahui memiliki nilai $IC_{50}=0,14\pm 0,02\mu M$. Penelitian yang bertujuan untuk mengetahui stabilitas kompleks DPP-IV dan apigenin dalam simulasi dinamika molekul 15 ns pada suhu tubuh, dilakukan secara teoritis deskriptif eksploratif dengan melihat kestabilan enzim DPP-IV. Hasil analisis penelitian menunjukkan apigenin pada pose 3 terjadi pembentukan kompleks senyawa yang stabil dengan nilai $\Delta RMSD$ atom-atom *backbone* DPP-IV sebesar $0,688 \text{ \AA}$ dan $\Delta RMSD$ *ligand move* sebesar $1,733 \text{ \AA}$. Nilai RMSF pada sisi aktif SER630, ASN710, dan HIS740 yang relatif rendah.

Kata kunci: Diabetes Melitus, Penghambat Dipeptidil Peptidase-IV (DPP-IV), Apigenin, Dinamika Molekul, *Root Mean Square Deviation* (RMSD)



ABSTRACT

Diabetes mellitus (DM) is a condition of increased blood glucose levels due to abnormalities in insulin secretion or insulin action. The type of diabetes with the highest number of diabetics, namely type 2 diabetes, occurs due to the loss of adequate pancreatic beta cell insulin secretion. Dipeptidyl Peptidase-IV (DPP-IV) inhibitors are one of the therapies that can be given to patients with type 2 diabetes mellitus. Flavonoid compounds are also widely used for anti-diabetics such as apigenin, apigenin is known to have an $IC_{50}=0.14 \pm 0.02\mu M$. The aim of this study was to determine the stability of the DPP-IV complex and apigenin in a molecular dynamics simulation of 15 ns at body temperature. The results of the research analysis showed that apigenin at pose 3 formed a stable compound complex by $\Delta RMSD$ values of DPP-IV backbone atoms of 0.688 \AA and $\Delta RMSD$ of ligand moves of 1.733 \AA . The RMSF values on the active sites of SER630, ASN710, and HIS740 are relatively low.

Keywords: *Diabetes Mellitus, Dipeptidyl Peptidase-IV (DPP-IV) Inhibitor, Apigenin, Molecular Dynamics, Root Mean Square Deviation (RMSD)*

