

ABSTRAK

STUDI *DOCKING* DAN DINAMIKA MOLEKUL SENYAWA TERPEN DAN FLAVONOID TANAMAN *ANDROGRAPHIS PANICULATA* SEBAGAI INHIBITOR *DPP4* TERHADAP PENYAKIT DIABETES MELITUS TIPE-2

Oleh:

Ilham Kiswandaru

11161086

Diabetes melitus (DM) merupakan keadaan kelainan metabolisme yang ditandai dengan resistensi terhadap insulin dan dapat berupa keadaan dimana tubuh tidak dapat mengsekresikan insulin yang cukup, atau keduanya. Herba *sambiloto* telah terbukti dapat menurunkan kadar gula dalam plasma dalam pengujian *in-vivo*. Inhibitor *DPP4* akan meningkatkan kadar hormon inkretin yang akan menstimulasi sekresi insulin dan akan mengontrol kadar gula dalam darah. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mempelajari dan memprediksi interaksi dari senyawa terpenoid dan flavonoid pada herba *sambiloto* sebagai ligan dengan target reseptor *DPP4*. Dilakukan penambatan molekul 14 ligan dengan target 6b1e dan diperoleh hasil ligan bisandrographolide dengan nilai energi bebas ikatan paling rendah ($-8,39$ kkal/mol). Sementara ligan andrographiside memperoleh nilai energi bebas sebesar ($-6,72$ kkal/mol). Hasil penambatan molekuler menunjukkan interaksi antara ligan bisandrographolide dan andrographiside menempati sisi pengikatan dari reseptor target. Analisis dinamika molekul ligan uji dengan RMSD dan RMSF yang stabil pada sisi pengikatan, menunjukkan interaksi stabil dalam waktu simulasi dinamika molekul. Sehingga ligan uji bisandrographolide dan andrographiside berpotensi sebagai inhibitor *DPP4* dalam upaya pengobatan diabetes melitus tipe-2.

Kata kunci: Docking, dinamika molekul, *sambiloto*, reseptor *DPP4*, diabetes melitus.

ABSTRACT

DOCKING AND MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF TERPENES AND FLAVONOIDS PLANT *ANDROGRAPHIS PANICULATA* COMPOUNDS AS *DPP4* INHIBITORS TO DIABETES MELLITUS TYPE-2

By:

Ilham Kiswandaru

11161086

Diabetes mellitus (DM) is a metabolic disorder characterized by resistance to insulin and may a condition where the body cannot secrete enough insulin, or both. The sambiloto herb has been shown to reduce plasma sugar levels in in-vivo testing. DPP4 inhibitors will increase incretin hormone that will stimulate insulin secretion and will control blood sugar levels. The purpose of the present research are to study and predict interactions of terpenes and flavonoids compounds in the sambiloto herb as a ligand with a DPP4 receptor target. 14 Ligand docking was carried out with the 6b1e target and the result of the ligand could bisandrographolide with the lowest free binding energy value ($-8,39$ kcal / mol). While andrographiside ligands obtain free energy values ($-6,72$ kcal/mol). Docking results indicate interactions between bisandrographolide and andrographiside ligands occupying the binding site of the target receptor. Analysis of the molecular dynamics ligands with RMSD and RMSF which were stable on the binding site showed stable interactions in the molecular dynamics simulation time. So that ligand bisandrographolide and andrographiside have the potential as DPP4 inhibitors in the treatment of type 2 diabetes mellitus.

Keywords: Docking, molecular dynamics, sambiloto, DPP4 receptor, diabetes mellitus.