

ABSTRAK

Nama : Shafa Sahira
Program Studi: Farmasi
Judul : Eksplorasi Aktivitas Biologi Asam Heksadekanoat sebagai Antidiabetes Melitus Tipe 2 (Pendekatan Menggunakan *PassOnline*, *STRING* dan *Molecular Docking*)

Diabetes Melitus merupakan suatu penyakit gangguan metabolik dengan penyebab utama gagalnya organ pankreas dalam memproduksi hormon insulin sebagaimana mestinya. *Dipeptidyl peptidase-4* (DPP4), *Peroxisome proliferator – activated receptors* (PPARs), dan *alpha-glucosidase* merupakan protein yang berkaitan dengan metabolisme glukosa di dalam tubuh sehingga memiliki potensi dalam menurunkan kadar gula di dalam darah. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui skor *docking* dan mekanisme kerja asam heksadekanoat terhadap enzim *alpha-glucosidase* (2JKE.PDB), enzim PPARG (*Peroxisome Proliferator Activated Receptor GAMMA*) (1KNU.PDB), enzim *Dipeptidyl Peptidase IV/CD26* (1N1M.PDB) sebagai antidiabetes melitus tipe 2. Metode penelitian yang digunakan dengan pendekatan *PassOnline*, *STRING* dan *Molecular Docking* untuk menentukan aktivitas biologi baru dari asam heksadekanoat sebagai antidiabetes melitus tipe 2. Berdasarkan Uji skrining senyawa asam heksadekanoat telah memenuhi persyaratan *Lipinski Rule of Five* untuk memulai penelitian. Hasil aktivitas biologi asam heksadeksanoat memiliki potensi sebagai kandidat obat baru antidiabetes ditandai dengan hasil skor *docking* asam heksadekanoat lebih stabil dengan hasil skor *docking* -86,31625 dibanding dengan hasil skor *docking ligand native* dengan skor *docking* -77,12456 terhadap *alpha-glucosidase* (2JKE). Mekanisme kerja asam heksadekanoat diketahui dapat bekerja sebagai inhibitor enzim *alpha glucosidase* sehingga dapat digunakan sebagai kandidat obat baru antidiabetes melitus tipe 2 yang ditandai dengan adanya interaksi antara asam heksadekanoat terhadap asam amino dari *alpha-glucosidase*

Kata Kunci:

Asam heksadekanoat, Diabetes Melitus, *Molecular Docking*, *PassOnline*, *STRING*

ABSTRACT

Name : Shafa Sahira
Major : Farmasi
Title : Exploration of Biological Activity of Hexadecanoic Acid as Antidiabetic Mellitus Type 2 (Approach Using PassOnline, STRING and Molecular Docking)

Diabetes Mellitus is a metabolic disorder disease with the main cause of the failure of the pancreas organ to produce the hormone insulin properly. Dipeptidyl peptidase-4 (DPP4), Peroxisome proliferator-activated receptors (PPARs), and alpha-glucosidase are proteins related to glucose metabolism in the body so they have the potential to lower blood sugar levels. This study aims to determine the docking score and mechanism of action of hexadecanoic acid on the alpha-glucosidase enzyme (2JKE.PDB), the PPARG (Peroxisome Proliferator Activated Receptor GAMMA) enzyme (1KNU.PDB), the Dipeptidyl Peptidase IV/CD26 enzyme (1N1M.PDB) as type 2 antidiabetes mellitus. The research method used was the PassOnline, STRING and Molecular Docking approaches to determine the new biological activity of hexadecanoic acid as an antidiabetic type 2 diabetes mellitus. Based on the screening test hexadecanoic acid complied with the Lipinski Rule of Five requirements to start the research. The results of the biological activity of hexadexanoic acid have the potential as a candidate for a new anti-diabetic drug characterized by a more stable docking score of hexadecanoic acid with a docking score of -86.31625 compared to a docking score of native ligand with a docking score of -77.12456 against alpha-glucosidase (2JKE) . The mechanism of action of hexadecanoic acid is known to work as an inhibitor of the alpha-glucosidase enzyme so that it can be used as a new drug candidate for type 2 diabetes mellitus which is characterized by the interaction between hexadecanoic acid and the amino acid of alpha-glucosidase.

Keywords :

Diabetes Melitus, Hexadecanoic acid, Molecular Docking, PassOnline, STRING