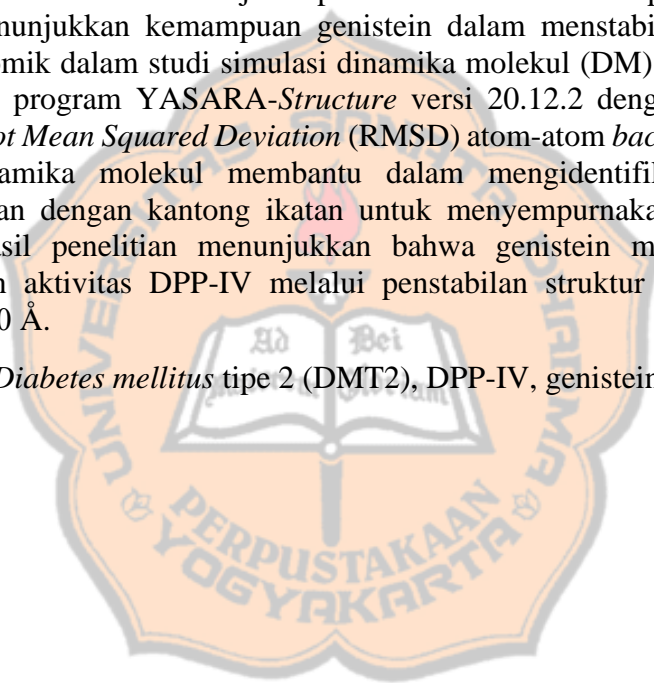


ABSTRAK

Diabetes Mellitus Tipe 2 (DMT2) merupakan penyakit yang disebabkan adanya kenaikan gula darah karena penurunan sekresi insulin yang rendah oleh kelenjar pankreas. Sampai saat ini, tercatat setidaknya ada 10 golongan obat yang dapat menurunkan kadar glukosa darah sehingga dijadikan pilihan terapi untuk DMT2, salah satunya yaitu dengan penghambatan enzim Dipeptidil Peptidase-IV (DPP-IV). Genistein diketahui dapat meningkatkan ekspresi insulin dari sel beta-pankreas dengan menstimulasi regenerasi pada proliferasi sel beta-pankreas, sehingga produksi insulin akan meningkat serta menurunkan kadar gula dalam darah pada penderita DMT2. Penelitian ini termasuk dalam jenis penelitian teoretis deskriptif eksploratif yang bertujuan menunjukkan kemampuan genistein dalam menstabilkan enzim DPP-IV pada level atomik dalam studi simulasi dinamika molekul (DM) dengan durasi 15 ns menggunakan program YASARA-*Structure* versi 20.12.2 dengan parameter utama yaitu nilai *Root Mean Squared Deviation* (RMSD) atom-atom *backbone* DPP-IV $\leq 2\text{\AA}$. Simulasi dinamika molekul membantu dalam mengidentifikasi interaksi yang dilakukan ligan dengan kantong ikatan untuk menyempurnakan pose ligan secara potensial. Hasil penelitian menunjukkan bahwa genistein memiliki kemampuan penghambatan aktivitas DPP-IV melalui penstabilan struktur enzim dengan nilai ΔRMSD 1,190 \AA .

Kata kunci: *Diabetes mellitus* tipe 2 (DMT2), DPP-IV, genistein, dinamika molekul



ABSTRACT

Type 2 of Diabetes Mellitus is caused by an increase in blood sugar due to a decrease in low insulin secretion by the pancreas gland. At least 10 classes of drugs that can lower blood glucose levels, so they are used as therapy options for T2DM and one of which is by inhibiting the enzyme Dipeptidyl Peptidase-IV (DPP-IV). Genistein is known to increase insulin expression from beta-pancreatic cells by stimulating regeneration in the proliferation of beta-pancreatic cells, so that insulin production will increase and reduce blood sugar levels in people with T2DM. This research belongs to the type of descriptive exploratory theoretical research that aims to demonstrate the ability of genistein to stabilize the DPP-IV enzyme at the atomic level in a molecular dynamics simulation study with a duration of 15 nanosecond using the YASARA-Structure version 20.12.2 with the main parameter being the Root Mean Squared Deviation (RMSD) DPP-IV backbone atoms $\leq 2\text{\AA}$. Molecular dynamics simulations help in identifying the interactions that the ligands have with the bonding pocket to enhance potential ligand poses. The results showed that genistein had the ability to inhibit DPP-IV activity by stabilizing the structure of the enzyme with a value of RMSD 1.190 \AA .

Keywords: *Type 2 of Diabetes Mellitus (T2DM), Dipeptidyl Peptidase-IV (DPP-IV), genistein, molecular dynamics*

