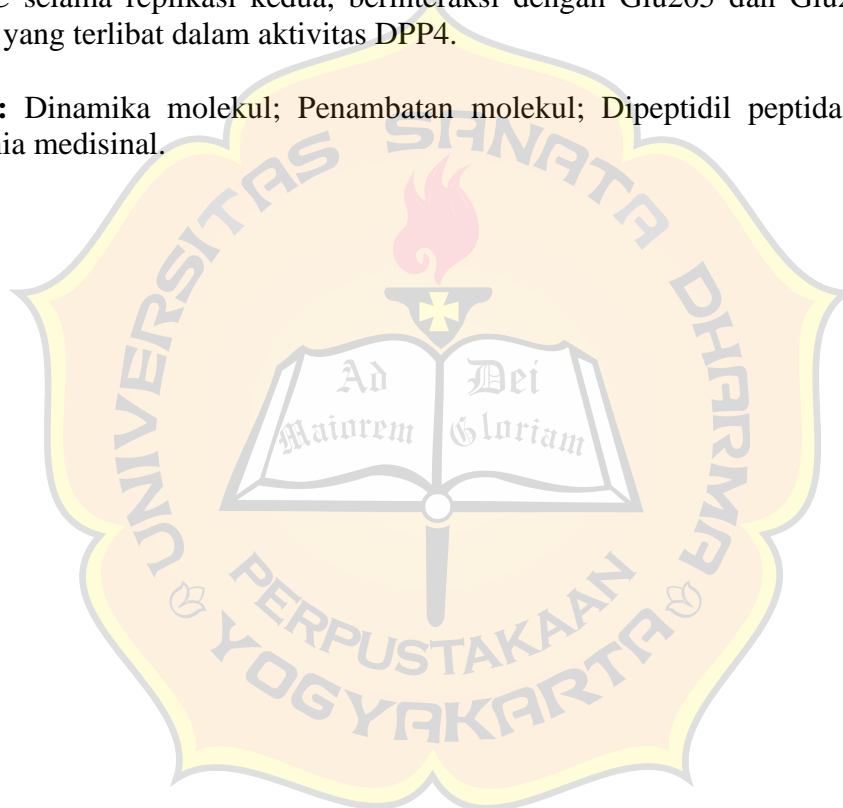


ABSTRAK

Diabetes melitus merupakan masalah kesehatan global yang membutuhkan solusi inovatif. Senyawa etil-4-[(α -L-rhamnosyloxy)-benzyl] carbamate (ERBC) yang terkandung dalam *Moringa oleifera* menunjukkan potensi sebagai penghambat dipeptidil peptidase-4 (DPP4) yang poten, dengan nilai IC_{50} sebesar 0,798 μ M. Simulasi dinamika molekuler menunjukkan bahwa ERBC berinteraksi secara spesifik dengan situs aktif DPP4, memberikan dasar mekanistik untuk aktivitas penghambatannya. Penelitian ini menggunakan teknik terbaru yang dikembangkan oleh *plug-in* yang telah dipublikasikan sebelumnya. Simulasi penambatan molekuler dilakukan sebanyak 100 kali. Kemudian, pose dikelompokkan untuk mengambil sampel pose yang memungkinkan yang kemudian dijadikan *input* dalam simulasi dinamika molekuler. Simulasi dinamika molekuler menunjukkan bahwa senyawa ERBC berinteraksi dengan protein DPP4 pada dua kemungkinan pose. Analisis PyPLIF HIPPOS menunjukkan bahwa ERBC selama replikasi kedua, berinteraksi dengan Glu205 dan Glu206, dua asam amino utama yang terlibat dalam aktivitas DPP4.

Kata Kunci: Dinamika molekul; Penambatan molekul; Dipeptidil peptidase-4; *Moringa oleifera*; Kimia medisinal.



ABSTRACT

*Diabetes mellitus is a global health problem that requires innovative solutions. Ethyl-4-[(α -L-rhamnosyloxy)-benzyl]carbamate (ERBC) compound contained in *Moringa oleifera* showed potential as a potent dipeptidyl peptidase-4 (DPP4) inhibitor, with an IC_{50} value of $0.798 \mu M$. Molecular dynamics simulations indicated that ERBC interacts specifically with the active site of DPP4, providing a mechanistic basis for its inhibitory activity. The research utilized the latest technique developed by previously published plug-ins. The molecular docking simulations were performed 100 times. Then, the poses are clustered to sample the probable poses which were then subjected as the inputs in molecular dynamics simulations. Molecular dynamics simulations have shown that the ERBC compound interacts with the DPP4 protein at two possible poses. PyPLIF HIPPOS analysis demonstrated that ERBC, during its second replication, interacts with Glu205 and Glu206, two key amino acids involved in DPP4 activity.*

Keywords: Dynamics simulation; Molecular docking; Dipeptidyl peptidase-4; *Moringa oleifera*; Medicinal chemistry.

