

Pembuatan pangkalan data senyawa bahan alam laut dan penapisannya terhadap PTP1B (protein tyrosine phosphatase 1B) sebagai antiobesitas dan antidiabetes tipe 2 = Constructing a marine database and its screening to PTP1B (protein tyrosine phosphatase 1B) as anti-obesity and anti-type 2 diabetes

Maria Rezitadina, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20474969&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Obesitas dan diabetes melitus tipe 2 merupakan penyakit yang banyak diderita oleh masyarakat saat ini. Dalam beberapa tahun belakangan, perkembangan senyawa antiobesitas dan antidiabetes tipe 2 diarahkan pada pengobatan dengan menginhibisi PTP1B. Hal ini dikarenakan PTP1B mendefosforilasi residu tirosin pada reseptor insulin dan substrat reseptor insulin yang dapat menyebabkan diabetes melitus tipe 2. Selain itu PTP1B juga mendefosforilasi janus kinase 2 pada jalur persinyalan leptin di hipotalamus yang dapat menyebabkan obesitas. Eksplorasi senyawa bioaktif dari bahan alam laut telah mendapat perhatian khusus akhir-akhir ini sebagai alternatif pengobatan. Pada penelitian ini dilakukan pembuatan pangkalan data senyawa bioaktif dari bahan alam laut, secara spesifik dari filum Echinodermata, fungi laut, dan rumput laut, serta penapisan secara in silico untuk memperoleh senyawa yang berpotensi sebagai inhibitor PTP1B menggunakan AutoDock dan AutoDock Vina. Berdasarkan hasil penapisan, didapatkan 9 senyawa aktif sebagai inhibitor PTP1B yang memiliki permeabilitas baik, yaitu FU0016, FU0050, FU0094, FU0156, FU0183, FU0184, FU0193, FU0194, dan FU0226. Empat senyawa diantaranya dapat menembus sawar darah otak, yaitu FU0156, FU0183, FU0194, dan FU0226. Senyawa tersebut berasal dari fungi laut genus *Neosartorya*, *Aspergillus* dan *Penicillium*. Selanjutnya diharapkan dapat dilakukan pembaharuan berkala pangkalan data dan eksplorasi lebih lanjut terhadap senyawa bioaktif dari bahan alam laut., serta pengujian lebih terhadap senyawa inhibitor PTP1B yang direkomendasikan.

<hr>

ABSTRACT

Obesity and type 2 diabetes mellitus are diseases which have a big number of prevalence nowadays. In the past few years, drug development for anti obesity and anti type 2 diabetes has been conducted to PTP1B inhibitors. It is because PTP1B dephosphorylates tyrosine residues in insulin receptor and insulin receptor substrate which cause type 2 diabetes mellitus. Besides, PTP1B also dephosphorylates janus kinase 2 in leptin signalling pathway which causes obesity. The exploration of bioactive compounds from marine materials as medication alternative has become a major concern lately. This study created a marine bioactive database, specifically from Echinodermata phylum, marine fungi, and alga, and conducted an in silico screening to obtain potential bioactive compounds as PTP1B inhibitor by using AutoDock and AutoDock Vina. Based on the screening results, nine compounds have been identified as inhibitor PTP1B which have good permeability, they are FU0016, FU0050, FU0094, FU0156, FU0183, FU0184, FU0193, FU0194, and FU0226. Four from them can also pass through blood brain barrier, which are FU0156, FU0183, FU0194, and FU0226. Those compounds are from genus *Neosartorya*, *Aspergillus* dan *Penicillium*. Therefore, periodically update of the marine database and further exploration about marine bioactive compound should

be conducted, also further research towards the recommended inhibitor PTP1B compounds.