

Analisis selektivitas inhibitor dipeptidil peptidase-IV (DPP- IV) terhadap bifidobacterium adolescentis dan prevotella pallens secara In-silico = Selectivity analysis of dipeptidyl peptidase-IV (DPP-IV) Inhibitor against bifidobacterium adolescentis and prevotella pallens in In-silico

Ratu Farah Nabila, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20495394&lokasi=lokal>

Abstrak

Diabetes merupakan gangguan metabolisme serius yang ditandai dengan hiperglikemia kronis karena produksi insulin yang tidak mencukupi (Tipe 1) atau resistensi insulin (Tipe 2). Akumulasi studi menunjukkan bahwa komposisi mikrobiota usus dapat mempengaruhi diabetes tipe 2. Salah satu strategi untuk pengobatan diabetes tipe 2 (T2DM) adalah inhibitor Dipeptidyl Peptidase-IV (DPP-IV). Bifidobacterium adolescentis dan Prevotella pallens adalah dua bakteri yang banyak terdapat di usus dan memiliki conserved sequence yang sama dengan DPP-IV. Penelitian dilakukan secara in-silico terhadap bakteri Bifidobacterium adolescentis dan Prevotella pallens untuk mengetahui selektivitas obat pada DPP-IV pada manusia dan bakteri. Penambatan molekuler dilakukan menggunakan AutoDock melalui program PyRx, selanjutnya dilakukan visualisasi interaksi hasil penambatan molekuler menggunakan PyMOL. Hasil homologi modeling didapatkan dari pemodelan dengan perangkat lunak SWISS-MODEL. Parameter optimasi yang didapatkan untuk penambatan molekuler DPP-IV adalah menggunakan gridbox 50x50x50 unit dengan energi evaluasi 5.000.000. Senyawa inhibitor DPP-IV yang menunjukkan indeks selektivitas terendah terhadap bakteri Bifidobacterium adolescentis adalah Vildagliptin, sementara terhadap Prevotella pallens adalah Sitagliptin.

.....Diabetes is a serious disease characterized by hyperglycemia due to insufficient insulin production (Type 1) or insulin resistance (Type 2). One strategy for the treatment of type 2 diabetes (T2DM) is a Dipeptidyl Peptidase-IV (DPP-IV) inhibitor. Bifidobacterium adolescentis and Prevotella pallens are two bacteria that are mostly found in human's gut and have similar conserved sequences to DPP-IV. This study tested selectivity of DPP-IV inhibitors against Bifidobacterium adolescentis and Prevotella pallens in in-silico to determine the selectivity of drugs against DPP-IV in humans and bacteria. Docking was done using AutoDock through the PyRx program, then visualizing the interaction of molecular results using PyMOL. Homology modeling results obtained from modeling with SWISS-MODEL software. The optimization parameters obtained for molecular docking of DPP-IV using a 50x50x50 unit box with 5.000.000 evaluation energy. DPP-IV inhibiting compound which shows the lowest selectivity index against Bifidobacterium adolescentis is vildagliptin, while Prevotella pallens is sitagliptin.