

Studi interaksi dan penambatan molekuler propolis Sulawesi Selatan sebagai obat diabetes melitus tipe 2 = Study of molecular docking and interaction of South Sulawesi propolis as type 2 diabetes mellitus drug

Muhammad Nizar Hamzah Al Faris, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20505939&lokasi=lokal>

Abstrak

Propolis merupakan senyawa resin yang dikumpulkan dan diolah oleh lebah madu dari berbagai macam sumber tanaman dan banyak digunakan sebagai obat tradisional. Propolis tersusun atas komponen yang bervariasi serta memiliki aktivitas biologis yang luas dimana salah satunya adalah aktivitas anti-diabetes. Diabetes melitus merupakan penyakit metabolik di seluruh dunia yang diindikasikan oleh hiperglikemia atau tingginya kadar gula darah. Penyakit ini disebabkan oleh defisiensi sekresi insulin, resistansi enzim insulin, atau kerusakan. Diantara klasifikasi diabetes melitus, tipe 2 adalah kasus paling banyak dengan proporsi 90 - 95% dari total kasus diabetes. Sayangnya, obat diabetes melitus komersial saat ini masih menghasilkan banyak efek samping yang berbahaya. Pada aktivitas antidiabetes propolis, penelitian umum yang dilakukan membahas nilai kritis seperti gula darah, HbA1c, dan berat badan subjek penelitian. Disisi lain, penelitian yang menjawab aktivitas antidiabetes masih terbatas pada struktur atau kelas senyawa kimia tertentu seperti pada flavonoid, steroid, dan isoflavonoid. Pada penelitian ini akan dilakukan pengujian aktivitas antidiabetes tipe 2 dari propolis secara *in silico* dan mempelajari mekanismenya pada tubuh manusia. Sebagai bentuk kebaruan, akan menggunakan 30 senyawa uji yang berasal dari dua kelompok propolis Sulawesi Selatan yaitu hasil penelusuran menggunakan LC-MS / MS dan berdasarkan publikasi Miyata et al. (2020). Penelitian ini diawali dengan penentuan target protein yang meregulasi diabetes melitus tipe 2. Kemudian persiapan bahan dilakukan untuk masing-masing ligan dan target protein. Selanjutnya dilakukan analisis penambatan molekuler, analisis interaksi molekuler, visualisasi 2D dan 3D. Berdasarkan hasil analisis, aktivitas antidiabetes tipe 2 diperoleh dari senyawa 1,2,2-Trimethyl-3 - [(4-methylphenyl) carbamoyl] cyclopentane carboxylic acid dengan menginhibisi Aldose Reductase, Macarangin dengan mengaktivasi NAD-Dependent protein deacetylase sirtuin-6, (1'S) -2-trans, 4-trans-absisic acid dengan menginhibisi Dipeptidyl Peptidase 4, serta Brousoflavonol F dan Glyasperin A dengan menginhibisi Fructose-1,6-bisphosphatase. Dari hasil analisis pada penelitian ini ditunjukkan bahwa aktivitas antidiabetes dari propolis sulawesi selatan terbukti pada skala atomik.

.....Propolis is a resin compound which is collected and processed by honey bees from various plant sources and is widely used as traditional medicine. Propolis is composed of various components and has extensive biological activity, one of which is anti-diabetic activity. Diabetes mellitus is a metabolic disease throughout the world that is indicated by hyperglycemia or high blood sugar levels. This disease is generally caused by deficiency of insulin secretion, insulin enzyme resistance, or both. Among the classification of diabetes mellitus, type 2 is the most cases with a percentage of 90 - 95% of the total diabetes cases. In antidiabetic activity of propolis, research is generally conducted to discuss critical values such as blood glucose, HbA1c, and body weight of research subjects. Unfortunately, current diabetes mellitus therapy still produces many dangerous side effects. On the other hand, research that answers the mechanism of antidiabetic activity is still limited to the structure or class of certain chemical compounds such as flavonoids, steroids, and isoflavonoids. This research will evaluate type 2 antidiabetic activity of propolis *in silico* and study its

mechanism in the human body. As a form of novelty, 30 molecules derived from two groups of South Sulawesi propolis, namely results of LC-MS / MS identification and based on the publication of Miyata et al. (2020). The research begins with the determination of target proteins which regulate type 2 diabetes mellitus. Then material preparation was carried out for each ligand and target protein. Furthermore, molecular docking analysis, molecular interaction analysis, 2D and 3D visualization were performed. Based on the analysis, type 2 antidiabetic activity was obtained from 1,2,2-Trimethyl-3 - [(4-methylphenyl) carbamoyl] cyclopentane carboxylic acid with the mechanism of inhibiting Aldose Reductase, Macarangin by activating the NAD-Dependent protein deacetylase sirtuin-6, (1'S) -2-trans, 4-trans-abscisic acid with the mechanism of inhibiting Dipeptidyl Peptidase 4, and Brousoflavonol F and Glyasperin A with the mechanism of inhibiting Fructose-1,6-bisphosphatase. From the results of the analysis in this study it was shown that the antidiabetic activity of South Sulawesi propolis was proven on the atomic scale.