

DESAIN IN SILICO PEPTIDA AKTIF INHIBITOR α -AMILASE BERBASIS PEPTIDA BIOAKTIF DARI KULIT ARI OAT (*Avena sativa*) SERTA UJI AKTIVITASNYA

Rumaisha Lale Handoyo
20/455487/PA/19702

INTISARI

Inhibisi α -amilase merupakan salah satu mekanisme pengobatan diabetes melitus tipe 2, dengan obat standar umum adalah akarbosa. Penggunaan berkepanjangan akarbosa memiliki efek samping gangguan pencernaan sehingga mendorong pengembangan inhibitor α -amilase baru yang lebih aman. Peptida adalah salah satu alternatif obat yang bersifat non-toksik dan beraktivitas tinggi. Peptida dengan urutan “YFDEQNEQFR” dari kulit ari oat (*Avena sativa*) memiliki nilai IC_{50} 37,5 μ M berdasarkan literatur. Penelitian ini bertujuan mengoptimasi struktur peptida “YFDEQNEQFR” untuk mendapatkan peptida inhibitor α -amilase baru yang lebih aktif.

Peptida “YFDEQNEQFR” dianalisis melalui sejumlah peladen dan penambatan digital, yaitu melalui PepSite2, CABS-dock, dan HADDOCK Server untuk mengkaji interaksinya dengan α -amilase. Sekuens “YFDEQNEQFR” dioptimasi dan dimodifikasi hingga mendapatkan sekuens baru yang lebih tinggi aktivitas dan interaksinya, yaitu “YKDGQNGQFR”. Peptida-peptida tersebut disintesis dan diuji secara *in-vitro* dengan Spektrofotometer UV-Vis.

Peptida “YFDEQNEQFR” menunjukkan nilai IC_{50} sebesar $33,22 \pm 0,62 \mu$ M dengan interaksi pada triad katalitik hanya pada Asp300 dan Glu233. Pada peptida modifikasi “YKDGQNGQFR” terdapat penurunan nilai IC_{50} menjadi $20,15 \pm 0,84 \mu$ M dan interaksi lebih kuat dengan triad katalitik pada Asp300, Asp197, dan Glu233. Peningkatan inhibisi ini menunjukkan keberhasilan modifikasi.

Kata kunci: Amilase pankreas, diabetes melitus, penambatan molekuler, peptida.

IN SILICO DESIGN OF α -AMYLASE INHIBITING ACTIVE PEPTIDE FROM OAT BRAN (*Avena sativa*) BIOACTIVE PEPTIDES AND ITS ACTIVITY ASSAY

Rumaisha Lale Handoyo
20/455487/PA/19702

ABSTRACT

Inhibition of α -amylase is one of medication of type 2 diabetes mellitus, with its one of most well-known standard medicine being acarbose. However, prolonged usage of acarbose can affect the digestive system, hence the development of new and safer α -amylase inhibitors. Peptides have become interesting medications in many field including α -amylase inhibitor due to the activities and non-toxic advantage. A peptide based on oat bran (*Avena sativa*), “YFDEQNEQFR”, is found to have 37.5 μ M for its IC₅₀ score. This research is aimed to optimize the structure of “YFDEQNEQFR” in order to obtain a novel α -amylase inhibitor peptide with better activity.

The peptide “YFDEQNEQFR” is analyzed through a couple of servers and digital docking, namely PepSite2, CABS-dock, and HADDOCK Server to study its interaction with α -amylase. “YFDEQNEQFR” is then optimized and modified to acquire a new sequence with higher activity and better interaction, which is “YKDGQNGQFR”. Both peptides are synthesized and tested through in-vitro activity assay with UV-Vis Spectrophotometry.

“YFDEQNEQFR” is reported to have an IC₅₀ of 33.22 \pm 0.62 μ M and show strong interactions only with Asp300 and Glu233 in regards of α -amylase’s catalytic triad. In turn, the modified peptide “YKDGQNGQFR” show a lower IC₅₀ of 20.15 \pm 0.84 μ M and stronger interactions with all of the catalytic triads; Asp300, Asp197, and Glu233. This increase in activity proves the success of the modification.

Keywords: Diabetes mellitus, molecular docking, pancreatic amylase, peptides.