

Doking Interaksi Kromium(III) dan Kromium(VI) dengan Protein Tirosin Fosfatase Sebagai Reseptor Insulin

Ambarwati, Y¹, Martoprawiro, M.A², Mulyani, I²,

¹Devisi Kimia anorganik, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung, Jalan Sumantri Brojonegoro No 01, Lampung 35141, Indonesia

²Devisi Kimia anorganik Fisik, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung, Jalan Ganesha 10, Bandung 40132, Indonesia
Email: yuli.ambarwati@fmipa.unila.ac.id

ABSTRAK— Fungsi senyawa kromium(III) sebagai antidiabetes terbukti dapat menurunkan kadar glukosa pada penderita diabetes tipe 2, namun mekanisme peran kromium(III) di dalam metabolisme glukosa belum dapat dijelaskan secara pasti. Berdasarkan studi *in vitro*, ada dua pendapat mengenai mekanisme peran kromium(III), pendapat pertama menyatakan bahwa kromium(III) yang masuk ke dalam tubuh yang langsung berinteraksi dengan protein tirosin fosfatase. Pendapat kedua, kromium(III) yang masuk ke dalam tubuh mengalami oksidasi menjadi kromium(VI), dan kromium(VI) ini yang berinteraksi dengan protein tirosin fosfatase. Untuk mengetahui mekanisme yang terjadi digunakan pemodelan dengan menggunakan kromium(III) pikolinat dan ion kromat sebagai kromium(VI) yang berinteraksi dengan protein tirosin fosfatase. Optimasi struktur senyawa kromium(III) pikolinat dan ion kromat dilakukan dengan metode komputasi *Hartree-Fock* yang berbasis set 6-31G(d). Sedangkan studi interaksinya dipelajari dengan menggunakan metode Autodock Vina dan ONIOM. Hasil interaksi doking kromium(III) pikolinat berinteraksi dengan Leu(13), Ile(16), Ser(47), Trp(49), Asn(50), dan Tyr(131) dengan energi interaksi sebesar $-7,00 \text{ kkal.mol}^{-1}$. Interaksi ion kromat berinteraksi dengan asam amino Leu(13), Gly(14), Ile(16), Cys(17) dan Arg(18) dengan energi interaksi $-4,10 \text{ kkal.mol}^{-1}$. Hasil energi interaksi kromium(III) pikolinat lebih rendah dari pada ion kromat, yang menunjukkan interaksi kromium(III) pikolinat dengan protein tirosin fosfatase lebih baik daripada interaksi ion kromat.

Keywords: kromium(III) pikolinat, protein tirosin fosfatase, doking

Docking Interaction Chromium(III) and Chromium(VI) with Protein Tyrosine Phosphatase as an Insulin Receptor

Ambarwati, Y¹, Martoprawiro, M.A², Mulyani, I²,

¹*Kimia anorganik division, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung, Jalan Sumantri Brojonegoro No 01, Lampung 35141, Indonesia*

²*Kimia anorganik fisik division, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung, Jalan Ganesha 10, Bandung 40132, Indonesia*
Email: yuli.ambarwati@fmipa.unila.ac.id

ABSTRACT— The function of chromium(III) compounds as antidiabetic is proven to reduce glucose levels in type 2 diabetics, but the mechanism of the role of chromium(III) in glucose metabolism has not been clearly explained. Based on in vitro studies, there are two opinions regarding the mechanism of the role of chromium(III), the first opinion states that chromium(III) enters the body which directly interacts with the protein tyrosine phosphatase. The second opinion, chromium(III) which enters the body experiences oxidation to chromium(VI), and this chromium(VI) which interacts with the protein tyrosine phosphatase. Modeling is used to find out the mechanism by using chromium(III) picolinate and ion chromate as chromium(VI) which interacts with the protein tyrosine phosphatase. Optimization of the structure of chromium (III) compounds picolinat and chromate ions was carried out using the Hartree-Fock computation method based on 6-31G(d). While the interaction study was studied using the Autodock Vina and ONIOM methods. The results of chromium (III) doxin interaction interact with Leu (13), Ile (16), Ser (47), Trp (49), Asn (50), and Tyr (131) with an interaction energy of $-7.00 \text{ kcal.mol}^{-1}$. Ion chromate interactions interact with amino acids Leu (13), Gly (14), Ile (16), Cys (17) and Arg (18) with interaction energy of $-4.10 \text{ kcal.mol}^{-1}$. The result of the interaction energy of chromium(III) picolinate is lower than the ion chromate, which shows the interaction of chromium(III) picolinate with the protein tyrosine phosphatase better than ion chromate.

Keywords: chromium(III) picolinate, protein tyrosine phosphatase, docking
