

Latar Belakang ///////

Dalam rangka Dies Natalis FMIPA Unpad ke-59 (Oktober 2017), Fakultas MIPA Unpad akan menyelenggarakan Seminar Nasional Bidang MIPA 2017 dengan tema: "Peran Matematika dan Sains dalam Menunjang Sustainable Development Goals (SGD)"

Kegiatan ini dilaksanakan sebagai sarana dan upaya penyebaran informasi atau diseminasi hasil-hasil penelitian bidang MIPA yang terdiri atas kajian bidang Matematika, Kimia, Fisika, Biologi, Statistika, Geofisika, Ilmu Komputer dan Teknik Elektronika beserta aplikasinya.

Melalui Seminar ini diharapkan dapat meningkatkan peran ilmu Dasar (MIPA) dalam upaya penelitian, pemanfaatan dan pengembangan sumber daya alam untuk pembangunan Indonesia yang berkelanjutan. Penyebartuasan Informasi hasil-hasil penelitian dasar (MIPA) kepada sesama peneliti, Pendidik, Lembaga Penelilian, Industri serta kepada Pemangku kepentingan lainnya dan sebagai media fasilitasi diskusi dan komunikasi perkembangan terbaru topik dan teknologi peneliban MIPA.

Tujuan ////////

Meningkatkan peran Ilmu Dasar (MIPA) dalam upaya penelitian, pemanfaatan dan pengembangan sumberdaya alam untuk pembangunan Indonesia.

Menyebarluaskan informasi hasil-hasil penelitian dasar (MIPA) kepada sesama peneliti, pendidik, lembaga penelitian, industri serta kepada pemangku kepentingan lainnya.

Media fasilitasi diskusi dan komunikasi perkembangan terbaru topik dan teknologi penelitian bidang MIPA.

Tanggal Penting Batas Akhir Pengiriman Abstrak 28 Oktober 2017 Pengumuman Penerimaan Abstrak- 4 November 2017 Batas Akhir Pembayaran - 10 November 2017 (Early Bird) Pelaksanaan Seminar - 23 November 2017



website: http://www.fmipa.unpad.ac.id/semnas/ telp: 022-7797712/fax: 022-7794545

ABSTRACT

Molecular Docking Studies of Chromium(III) Picolinate with Protein Tyrosine Phosphatase

Yuli Ambarwati¹, Muhamad A. Martoprawiro², Irma Mulyani², Ismunandar², <u>D</u>julia Onggo²

¹Inorganic Chemistry Division, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Lampung, Jalan Sumantri Brojonegoro No 01, Lampung 35141, Indonesia ²Inorganic and Physical Chemistry Division, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Institut Teknologi Bandung, Jalan Ganesha 10, Bandung 40132, Indonesia

ABSTRACT—Chromium(III) complexes was suggested as an essential nutrient that play a role in carbohydrate metabolism. Many studies in biological activity of Cr(III) complexes as an antidiabetic have been performed. Based on *in vitro* studies, the ability of some Cr(III) complexes to inhibit tyrosine phosphatase activity of insulin receptor was proposed as the chemical mechanism of Cr(III) in glucose metabolism. In this research, the interaction of Cr(III) picolinate [Cr(pic)₃] with protein tyrosine phosphatase (PTP) was studied by molecular docking. The aims this study was to identify the active site of PTP that binding with those Cr(III) picolinate. This research used computational calculations, the method used was Hartree-Fock with basis set 6-31G, the interaction with PTP used the Autodck Vina software. The results showed that [Cr(pic)₃] interact with 6 amino acids of PTP, i.e Leu13, Ile16, Ser47, Trp49, Asn50 and Tyr131 with the interaction energy of -7,0 Kcal/mol. The results showed that the interaction between Cr(III) picolinate with PTP indicate Van der Waals interaction.

Keywords: Chromium(III) picolinate, PTP, Docking



Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Padjadjaran

SERTIFIKAT

diberikan kepada:

Yuli Ambarwati

Sebagai Pemakalah

Seminar Nasional Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (SemNas MIPA) dengan tema:

"Peran Matematika dan Sains Dalam Menunjang Sustainable Development Goals (SDGs)"

Jatinangor, 23 November 2017

Prof. Dr. Sudradjat, MS NIP 19580519 198601 1 001 Ketua Pelaksana,

Dr. Ruhyat Partasasmita, M.Si. NJP 19680115 199702 1 001