

ABSTRAK

Insulin merupakan terapi utama untuk mengatasi Diabetes Mellitus, penyakit yang marak di dunia. Pemberian insulin secara injeksi yang umum di masyarakat bersifat kurang praktis dan dapat menimbulkan efek samping. Disisi lain, pemberian insulin oral masih memiliki kendala seperti ketidakmampuan untuk menembus usus dan mudah terdegradasi di sistem pencernaan manusia. Oleh karena itu, penting untuk ditemukan cara untuk mengatasi permasalahan ini. Teknologi nanopartikel dapat digunakan untuk masalah ini karena bersifat mukoadhesif, biokompatibel, biodegradable, dan non-toksik. Tujuan penelitian ini adalah untuk menentukan polimer terbaik berdasarkan interaksi molekuler pada setiap polimer (kitosan, alginat, dan gelatin) dengan insulin dan menganalisis karakteristik nanopartikel insulin dengan polimer terpilih. Penelitian ini mencakup uji *in silico* yaitu *molecular docking* untuk melihat interaksi molekuler dengan program BIOVIA, Hex, dan Pymol serta *molecular dynamic* menggunakan Charm-Gui, NAMD, dan VMD untuk dianalisis nilai RMSF dan RMSD. Hasil uji *in silico* menunjukkan kitosan sebagai polimer terbaik dengan ikatan paling stabil ditunjukkan dengan banyaknya ikatan hidrogen dan kovalen diperkuat dengan gaya Van Der Waals. Selain itu, interaksi insulin-kitosan memiliki nilai RMSF dibawah 3 nm dan RMSD tidak melampaui 1,5nm yang berarti seluruh interaksi insulin-kitosan tersebut tidak akan mengalami pemutusan ikatan dan memiliki konformasi stabil pada sistem pencernaan manusia. Berdasarkan hasil tersebut, preparasi nanopartikel insulin-kitosan perlu dilanjutkan dengan menggunakan metode gelasi ionik ditambah teknik sonikasi seperti pada sampel 2. Hasil karakterisasi nanopartikel insulin-kitosan sampel 1 menunjukkan ukuran 67,78 nm, dengan PDI 0,432 nm, dan zeta potensial -11,04 mV, dan nilai EE 86,6%. Sedangkan sampel 2 sebesar 112,5 nm dengan PDI (Polidispersity Index) sebesar 0,764, zeta potensial sebesar -43,53 mV, dan nilai EE sebesar 90,5%. Hasil tersebut menunjukkan nanopartikel insulin-kitosan memiliki kondisi baik dan stabil sehingga berpotensi menjadi obat oral insulin.

Kata kunci: Alginat, Gelatin, Insulin, Kitosan, Nanopartikel.

ABSTRACT

Insulin is the primary therapy to treat Diabetes Mellitus, a widespread disease globally. The injection, a standard way to administrate insulin, is impractical and can cause side effects. In contrast, oral insulin administration still has problems, such as the inability to penetrate the intestine wall, and is easily degraded by the human digestive system. Therefore, it is vital to unravel this problem. Nanoparticle technology can be utilized here because of its mucoadhesive, biocompatible, biodegradable, and non-toxic properties. This study aimed to determine the best polymer based on the molecular interactions of polymers (chitosan, alginate, and gelatin) with insulin and to analyze the characteristics of insulin nanoparticles with the selected polymers. This research included *in silico* trials like molecular docking to examine molecular interactions with the BIOVIA, Hex, and Pymol programs as well as molecular dynamics using Charm-Gui, NAMD, and VMD to analyze RMSF and RMSD. The *in-silico* trial showed chitosan as the best polymer for insulin, with the most stable interaction indicated by the numerous hydrogen and covalent bonds strengthened by Van Der Waals forces. Besides, RMSF below 3 nm and RMSD not exceeding 1.5 nm so that all insulin-chitosan interactions will not be broken and have a stable conformation in the human digestive system. Based on these results, it is necessary to prepare chitosan-insulin nanoparticles using the ionic gelation method plus sonication techniques as in sample 2. The results of the characterization of insulin-chitosan nanoparticles of sample 1 showed a size of 67.78 nm, with a PDI of 0.432 nm, and a potential zeta of -11.04 mV, and an EE value of 86.6%. While sample 2 was 112.5 nm with a PDI (Polidispersity Index) of 0.764, a potential zeta of -43.53 mV, and an EE value of 90.5%. The results show that insulin-chitosan nanoparticles have good and stable conditions so that they have the potential to become oral insulin drugs.

Key Word: Alginate, Chitosan, Gelatin, Insulin, Nanoparticle.