

ABSTRAK

Nama : Bagas Apriliano Wijanarko
Program Studi : Farmasi
Judul : Studi *Molecular Docking* Senyawa Flavonoid Quercetin Daun Mimba (*Azadiracta indica* A. Juss) Sebagai Antidiabetes dan Antioksidan

Daun mimba (*Azadiracta indica* A. Juss) banyak mengandung flavonoid terutama senyawa quercetin yang berkhasiat sebagai antidiabetes dan antioksidan. Tujuan dari penelitian ini untuk mengetahui aktivitas senyawa quercetin tersebut pada reseptor *proliferator-activated receptors-gamma* (PPAR- γ), *Dipeptidyl peptidase-4* (DPP4) dan *Reactive Oxygen Species* (ROS) menggunakan metode *structure based drug design*. Pada penelitian ini, hasil validasi metode *docking* diperoleh nilai *free energy binding* untuk *ligand Propionic Acid* pada reseptor PPAR-y yaitu -10,7 kcal/mol, dengan nilai konstanta inhibisi sebesar 14,43 nM. Sedangkan untuk *ligand Heterocyclic* DPP4 inhibitor pada reseptor DPP4 memiliki nilai *energy binding* -14,77 kcal/mol, konstanta inhibisi 14,86 pM. Kemudian untuk *ligand* PF-06463922 pada reseptor ROS kinase memiliki nilai *energy binding* -6,87 kcal/mol, konstanta inhibisi 9,15 μ M. Berdasarkan hasil yang diperoleh pada penelitian ini, dapat disimpulkan bahwa quercetin memiliki aktivitas antidiabetes melalui aktivasi PPAR-y dan Inhibisi DPP4. Senyawa quercetin juga menunjukkan aktivitas yang berarti pada penghambatan ROS sehingga mampu mencegah terjadinya stres oksidatif yang menjadi pencetus utama penyakit degeneratif termasuk diantaranya adalah diabetes melitus.

Kata Kunci: Antidiabetes, Antioksidan, Daun Mimba, *Molecular Docking*, Quercetin.

ABSTRACT

Nama : Bagas Apriliano Wijanarko
Program Studi : Pharmacy
Judul : Molecular Docking Analysis of Flavonoid Quercetin Compounds from Neem Leaves (*Azadiracta indica A. Juss*) as Antidiabetic and Antioxidant Compounds

Neem leaves contain lots of flavonoids, especially quercetin, which is useful as an antidiabetic and also as an antioxidant. The purpose of this study was to determine the activity of the quercetin compound on Proliferator-Activated Receptors-Gamma (PPAR- γ), Dipeptidyl Peptidase-4 (DPP4) and Reactive Oxygen Species (ROS) receptors using the structure based drug design method. The validation results of the docking method obtained the free energy binding value for the propionic acid ligand at the PPAR- γ receptor, namely -10,7 kcal/mol, with an inhibition constant value of 14,43 nM. Meanwhile, the heterocyclic DPP4 inhibitor ligand on the DPP4 receptor has an energy binding value of -14,77 kcal/mol and an inhibition constant of 14,86 pM. Then, for the PF-06463922 ligand on the ROS receptor kinase, it has a binding energy value of -6,87 kcal/mol and an inhibition constant of 9,15 M. Based on the results obtained, it can be concluded that quercetin has antidiabetic activity through activation of PPAR- γ and inhibition of DPP4. Quercetin also showed significant activity in inhibiting ROS so that it can prevent oxidative stress, which is the main trigger for degenerative diseases including diabetes mellitus.

Keywords: antidiabetic, antioxidant, neem leaf, molecular docking, quercetin.