

ABSTRAK

Nama : Nanti Refizha Vona
Program Studi : Farmasi
Judul : *Docking* Molekuler Senyawa Aktif Kayu Manis (*Cinnamomum burmannii* Blume) Terhadap Protein α -Glukosidase Pada Diabetes Melitus

Diabetes merupakan penyakit metabolik yang ditandai dengan meningkatnya kadar gula darah normal yang terbagi atas beberapa bagian yaitu diabetes melitus tipe I, diabetes melitus tipe II, diabetes gestasional, dan diabetes tipe lain. Tujuan penelitian untuk mencari senyawa aktif yang terdapat pada kayu manis (*Cinnamomum burmannii* Blume) yang memiliki aktivitas sebagai antidiabetik dengan cara menghambat protein α -Glukosidase pada Diabetes Melitus menggunakan metode penambatan molekul (*docking molecular*) untuk prediksi struktur kompleks senyawa. Senyawa metabolit sekunder tanaman kayu manis yang memenuhi kriteria *Lipinski's Rule of Five* dengan struktur kristal α -Glukosidase dengan kode PDB 3WY1. Perangkat lunak yang digunakan yaitu YASARA, MarvinSketch, dan PLANTS yang merupakan suatu program yang dapat mengoptimasi ligan serta menambatkan molekul ligan dengan makromolekul reseptor. Kemudian divisualisasikan menggunakan Discovery Studio serta dilakukan analisa prediksi ADMET, dan PASS online. Hasilnya menunjukkan skor *docking* delapan senyawa aktif kayu manis lebih negatif dari miglitol, pada senyawa Nerolidol -84,9045, alpha-Sinensal -81,8875, Tetradecanal -78,4581, Epi-catechin -77,2049, Benzyl benzoate -75,1558, 1,7,7-trimethyl-bicyclo -73,6186, Elemol -71,4774, dan senyawa Bulnesol -70,0438. Hasil visualisasi kompleks protein ligan menunjukkan bahwa senyawa aktif kayu manis memiliki interaksi kestabilan, farmakokinetik dan potensi yang baik sebagai obat.

Kata kunci :
Diabetes Melitus, *Docking*, α -Glukosidase, Kayu Manis

ABSTRACT

Name : Nanti Refizha Vona
Major : Pharmacy
Title :Molecular Docking of Cinnamon Active Compounds (Cinnamomum burmannii Blume) Against Protein α -Glukosidase in Diabetes Melitus

Diabetes is a metabolic disease characterized by an increase in normal blood sugar levels which is divided into several parts, namely diabetes mellitus type I, diabetes mellitus type II, gestational diabetes, and other types of diabetes. The purpose of this study was to find the active compound in cinnamon (Cinnamomum burmannii Blume) which has antidiabetic activity by inhibiting α -glucosidase protein in Diabetes Mellitus using the molecular docking method for predicting the complex structure of the compound. Cinnamon secondary metabolite compounds that meet Lipinski's Rule of Five criteria with the structure of α -Glucosidase with PDB code 3WY1. The software used is YASARA, MarvinSketch, and PLANTS which is a program that can optimize ligands and attach ligand molecules to receptor macromolecules. Then visualized using Discovery Studio and analysis of ADMET predictions, and PASS online. The results showed that the docking scores of eight active cinnamon compounds were higher than Miglitol, in the compound Nerolidol -84,9045, alpha-Sinensal -81,8875, Tetradecanal -78,4581, Epi-catechin -77,2049, Benzyl benzoate -75,1558, 1,7,7-trimethyl-bicyclo -73,6186, Elemol -71,4774, and Bulnesol compound -70,0438. The results of visualization of the protein ligand complex showed that the active compound of cinnamon had good stability, pharmacokinetic interactions and potential as a drug.

Keywords :

Diabetes Melitus, Docking, α -Glukosidase, Cinnamon