

ABSTRAK

Oleh :

Rizki Dyah Rahmawati

191FF03061

DM adalah sindrom metabolik berupa hiperglikemia kronis akibat gangguan sekresi dan/atau kerja insulin. Penyakit ini memiliki prevalensi yang tinggi dan meningkat setiap tahun. Salah satu obat yang digunakan untuk mengobati diabetes tipe 2 adalah *Alpha-Glucosidase Inhibitor* (AGI). Namun obat golongan ini dilaporkan menimbulkan efek samping gastrointestinal. Tanaman herbal yang bisa dijadikan alternatif adalah daun kenikir (*Cosmos caudatus*). Tujuan dari penelitian ini adalah menentukan afinitas dan kestabilan interaksi senyawa dari daun kenikir (*Cosmos caudatus*) yang berpotensi menghambat enzim α -glukosidase sebagai antidiabetes. Hipotesis dari penelitian ini adalah diduga senyawa-senyawa dari daun Kenikir dapat menghambat enzim secara *in silico* sehingga berpotensi sebagai senyawa-senyawa antidiabetes. Penelitian ini menggunakan metode eksperimental dengan melakukan metode *docking* dan simulasi dinamika molekul secara *in silico* antara senyawa uji dengan protein target. Berdasarkan hasil *docking* 41 senyawa dan hasil simulasi dinamika molekul 8 ligan uji terhadap enzim α -glukosidase, *Quercetin 3-O- α -rhamnoside* memiliki nilai energi bebas ikatan (Δ Total) yang paling rendah yakni sebesar -9.7404 sehingga memiliki kestabilan interaksi yang paling baik.

Kata Kunci : AGI, *Acarbose*, *Cosmos caudatus*, Penambatan Molekul, Dinamika Molekul

ABSTRACT**By :****Rizki Dyah Rahmawati****191FF03061**

DM is a metabolic syndrome in the form of chronic hyperglycemia due to impaired insulin secretion and/or action. This disease has a high prevalence and increases every year. One of the drugs used to treat type 2 diabetes is Alpha-Glucosidase Inhibitor (AGI). However, this class of drugs has been reported to cause gastrointestinal side effects. Herbal plants that can be used as an alternative are marigold leaves (Cosmos caudatus). The purpose of this study was to determine compounds from kenikir (Cosmos caudatus) leaves that have the potential to inhibit the α -glucosidase enzyme as an antidiabetic. The hypothesis of this study is that compounds from Kenikir leaves can inhibit enzymes in silico so that they have the potential as anti-diabetic compounds. This study used an experimental method by carrying out the docking method and in silico molecular dynamics simulation between the test compound and the target protein. Based on the results of the docking of 41 compounds and the results of molecular dynamics simulations of the 8 tested ligands for the α -glucosidase enzyme, Quercetin 3-O- α -rhamnoside has the lowest bond free energy ($\Delta Total$) value of -9.7404 so that it has the best interaction stability.

Keywords : AGI, Acarbose, Cosmos caudatus, Molecular Docking, Molecular Dynamics