

**PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA
MOLEKUL METABOLIT SENYAWA DI DALAM WATER KEFIR
TERHADAP ENZIM α -GLUKOSIDASE SEBAGAI KANDIDAT
SENYAWA PEMANDU ANTIDIABETES**

**NURMALASARI
201FF03083**

Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi
Universitas Bhakti Kencana

ABSTRAK

Diabetes tipe 2 suatu kondisi yang ditandai oleh resistensi insulin dan hiperglikemia, merupakan tantangan kesehatan global yang memerlukan pengembangan terapi alternatif. Salah satu terapi diabetes mellitus menargetkan alfa glukosidase yang merupakan enzim kunci dalam metabolisme karbohidrat yang berperan dalam penyerapan glukosa. *Water kefir* merupakan minuman fermentasi yang dihasilkan dari interaksi simbiotik berbagai mikroorganisme, telah menunjukkan potensi sebagai sumber senyawa bioaktif. Penelitian sebelumnya telah mengungkapkan bahwa *water kefir* mengandung molekul-molekul dengan aktivitas biologis yang beragam, termasuk potensi antidiabetes. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui senyawa dalam *water kefir* yang berpotensi memiliki afinitas sebagai antidiabetes. Metode penambatan molekul digunakan untuk memprediksi parameter ΔG dan K_i menggunakan perangkat lunak AutoDock. Sementara itu, dinamika molekul dilakukan menggunakan perangkat lunak Gromacs untuk mengevaluasi perubahan struktural dan energetik selama simulasi dengan menganalisis RMSD, RMSF, dan MMGBSA untuk memahami stabilitas kompleks ligan-enzim. Hasil penelitian dari 20 senyawa uji menunjukkan bahwa 2,4-di-tert-butylphenol, Butylhydroxytoluene, dan Ethyl Benzenepropanoate memiliki potensi interaksi dengan enzim alfa glukosidase. Nilai penambatan molekul masing-masing -6,18 kkal/mol dan 29,621 μ M, -5,49 kkal/mol dan 93,79 μ M, -5,11 kkal/mol dan 178,67 μ M. Analisis dinamika molekul menunjukkan nilai Δ TOTAL berturut-turut -26,52 kkal/mol, -21,43 kkal/mol, dan -27,48 kkal/mol, menunjukkan interaksi yang kuat antara ligan-ligan ini dengan enzim alfa glukosidase.

Kata Kunci : diabetes tipe 2, *Water kefir*, Enzim alfa-Glukosidase, Penambatan molekul dinamika molekul

**MOLECULAR TETHERING AND SIMULATION OF MOLECULAR
DYNAMICS OF METABOLITE MOLECULES IN WATER KEFIR
AGAINST α -GLUCOSIDASE ENZYME AS A CANDIDATE FOR
ANTIDIABETIC GUIDE COMPOUND**

**NURMALASARI
201FF03083**

Department of Pharmacy, Faculty of Pharmacy,
Universitas Bhakti Kencana

ABSTRACT

Type 2 diabetes, a condition characterized by insulin resistance and hyperglycemia, is a global health challenge that requires the development of alternative therapies. One of the therapies for diabetes mellitus targets alpha glucosidase which is a key enzyme in carbohydrate metabolism that plays a role in glucose absorption. Water kefir is a fermented drink produced from the symbiotic interaction of various microorganisms, has shown potential as a source of bioactive compounds. Previous research has revealed that water kefir contains molecules with diverse biological activities, including antidiabetic potential. This study aims to find out the compounds in water kefir that have the potential to have an affinity as an antidiabetic. The molecular tethering method is used to predict the ΔG and K_i parameters using AutoDock software. Meanwhile, molecular dynamics were performed using Gromacs software to evaluate structural and energetic changes during simulation by analyzing RMSD, RMSF, and MMGBSA to understand the stability of the ligand-enzyme complex. The results of the study of 20 test compounds showed that 2,4-di-tert-butylphenol, Butylhydroxytoluene, and Ethyl Benzenepropanoate had potential interactions with the enzyme alpha glucosidase. The molecular anchoring values were -6.18 kcal/mol and 29.621 μ M, -5.49 kcal/mol and 93.79 μ M, -5.11 kcal/mol and 178.67 μ M, respectively. Molecular dynamics analysis showed that the total Δ values were -26.52 kcal/mol, -21.43 kcal/mol, and -27.48 kcal/mol, respectively, indicating a strong interaction between these ligands and the alpha glucosidase enzyme.

Keywords: type 2 diabetes, Water kefir, Alpha-Glucosidase enzyme, Molecular dynamics molecular tethering