

STUDI AFINITAS DAN KESTABILAN INTERAKSI SENYAWA DARI ALGA HIJAU (*Halimeda tuna*) TERHADAP ENZIM ALFA AMILASE SEBAGAI ANTIDIABETES

NINA NURAFIANI PUTRI

201FF03172

Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi

Universitas Bhakti Kencana

ABSTRAK

Diabetes Mellitus merupakan suatu kondisi yang ditandai oleh resistensi insulin dan hiperglikemia. Diabetes mellitus menjadi tantangan kesehatan global yang memerlukan pengembangan terapi alternatif. Salah satu terapi diabetes mellitus menargetkan alfa amilase yang merupakan enzim kunci dalam metabolisme karbohidrat yang berperan dalam penyerapan glukosa. Alga hijau (*Halimeda tuna*) dikenal memiliki potensi antioksidan dan antidiabetes, menunjukkan aktivitas menghambat alfa amilase yang menjanjikan. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi afinitas dan stabilitas interaksi antara senyawa-senyawa dari (*Halimeda tuna*) dengan enzim alfa amilase sebagai agen antidiabetes yang potensial. Metode penambatan molekul digunakan untuk memprediksi parameter ΔG dan K_i menggunakan perangkat lunak AutoDock. Sementara itu, dinamika molekul dilakukan mengevaluasi perubahan struktural dan energetik selama simulasi dengan menganalisis RMSD, RMSF, dan MMGBSA untuk memahami stabilitas kompleks ligan-enzim menggunakan perangkat lunak Gromacs. Hasil penelitian dari 45 senyawa uji menunjukkan bahwa SU32, SU34, dan SU33 memiliki potensi interaksi dengan enzim alfa amilase. Nilai ΔG dan K_i hasil penambatan molekul masing-masing -8,92 kkal/mol dan 2,28 μm , -8,63 kkal/mol dan 0,47 μm , -8,35 kkal/mol dan 0,75 μm . Analisis dinamika molekul menunjukkan nilai ΔE_{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 alfa amilase. Penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa-senyawa dari *Halimeda tuna*, khususnya SU32, SU34, dan SU33, memiliki potensi sebagai agen antidiabetes melalui interaksi yang kuat dengan alfa amilase. Penemuan ini mendukung pengembangan potensial terapi baru berbasis alam untuk pengelolaan diabetes mellitus.

Kata kunci : Alfa-amilase, *Halimeda tuna*, diabetes mellitus, penambatan molekul dinamika molekul

**A STUDY OF THE AFFINITY AND STABILITY OF THE INTERACTION
OF SEEDS OF GREEN ALGAE (*Halimeda tuna*) WITH THE ENZYME
ALPHA AMYLASE AS AN ANTIDIABETIC.**

NINA NURAFIANI PUTRI

201FF03172

Undergraduate Pharmacy Study Program, Faculty of Pharmacy
Bhakti Kencana University

ABSTRACT

*Diabetes Mellitus is a condition characterized by insulin resistance and hyperglycemia. Diabetes mellitus has become a global health challenge that requires the development of alternative therapies. One of the therapies for diabetes mellitus targets alpha-amylase, which is a key enzyme in carbohydrate metabolism that plays a role in glucose absorption. Green algae (*Halimeda tuna*) is known to have antioxidant and antidiabetic potential, showing promising alpha-amylase inhibitory activity. This research aims to evaluate the affinity and stability of the interactions between compounds from (*Halimeda tuna*) and alpha-amylase enzyme as a potential anti-diabetic agent. The molecular docking method is used to predict the parameters ΔG and K_i using AutoDock software. Meanwhile, molecular dynamics is performed to evaluate structural and energetic changes during the simulation by analyzing RMSD, RMSF, and MMGBSA to understand the stability of the ligand-enzyme complex using Gromacs software. The research results from 45 tested compounds indicate that SU32, SU34, and SU33 have the potential to interact with the enzyme alpha amylase. The values of ΔG and K_i resulting from the binding of each molecule are -8.92 kkal/mol and 2.28 μm , -8.63 kkal/mol and 0.47 μm , -8.35 kkal/mol and 0.75 μm . Molecular dynamics analysis shows the values of ΔE_{TOTAL} are -26.52 kkal/mol, -21.43 kkal/mol, and -27.48 kkal/mol, indicating strong interactions between these ligands and alpha-amylase. This research shows that compounds from *Halimeda tuna*, particularly SU32, SU34, and SU33, have the potential to act as antidiabetic agents through strong interactions with alpha amylase. This discovery supports the potential development of new nature-based therapies for the management of diabetes mellitus.*

Keyword : Alpha-amylase, *Halimeda tuna* , Diabetes mellitus, Molecular docking, Molecular dynamics