

INTISARI

NURMAYLINDHA, V., 2019, STUDI BIOINFORMATIKA KANDUNGAN KIMIA TANAMAN LAMTORO (*Leucaena leucocephala* Lam.) DAN BIJI KLABET (*Trigonella foenum-graecum*) SEBAGAI ANTIDIABETES, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Enzim α -glukosidase (α -G), protein tirosin posfatase-1B (PTP-1B), glukokinase (GK), dan dipeptidil peptidase-4 (DPP4) merupakan enzim yang berperan dalam diabetes. Dalam penelitian ini, senyawa dari tanaman lamtoro (*L. leucocephala*) dan biji klabet (*T. foenum-graecum*) yang memiliki potensi sebagai antidiabetes digunakan sebagai ligan dan enzim α -G, PTP-1B, GK, dan DPP4 sebagai target molekuler untuk mengetahui interaksi obat dengan reseptor dan prediksi ADME senyawa kandidat.

Penelitian ini memprediksi interaksi senyawa dari kedua tanaman dengan target molekuler antidiabetes, kemudian dilakukan *docking* molekuler menggunakan perangkat lunak PyRx 0.8, lalu divisualisasikan menggunakan *Discovery Studio Visualizer* dan PyMol, serta diprediksi ADME menggunakan SwissADME.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa lamtoro yaitu nicotiflorin memiliki nilai afinitas pengikatan yang lebih baik pada DPP4 dan α -G serta luteolin-7-glucoside pada protein GK dan PTP-1B. Berdasarkan prediksi interaksi yang terbaik untuk masing-masing target yaitu quercetin-3-O-rhamnoside, nicotiflorin, rhaponticin, luteolin-7-glucoside, chrysoeriol, rhapontigenin, isorhamnetin-3-O-galactoside, orientin, dan isorhamnetin. Prediksi ADME menunjukkan senyawa flavonoid dari lamtoro yaitu chrysoeriol memenuhi syarat Lipinski, tidak berdifusi pada sawar otak, bukan P-glikoprotein substrat dan dapat dimetabolisme dengan baik.

Kata kunci : Antidiabetes, *Leucaena leucocephala*, *Trigonella foenum-graecum*, *docking* molekuler

ABSTRACT

NURMAYLINDHA, V, 2019, STUDY BIOINFORMATICS OF LAMTORO (*Leucaena leucocephala* Lam.) AND SEED KLABET (*Trigonella foenum-graecum*) CHEMICAL CONSTITUENS AS ANTIDIABETIC AGENTS, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

The enzyme α -glucosidase (α -G), protein tyrosine posfatase-1B (PTP-1B), glucokinase (GK), and dipeptidyl peptidase-4 (DPP4) are enzymes that play a role in diabetes. In this study, compounds from the lamtoro plant (*L. leucocephala*) and klabet seed (*T. foenum-graecum*) which have antidiabetic potential are used as ligands and enzymes α -G, PTP-1B, GK, and DPP4 as molecular targets to determine Drug interactions with receptors and ADME prediction of candidate compounds.

This study predicts the interaction of compounds from both plants with antidiabetic molecular targets, then molecular docking is done using PyRx 0.8 software, then visualized using Discovery Studio Visualizer and PyMol, and ADME is predicted using SwissADME.

The results showed that the lamtoro compound, nicotiflorin, had a better binding affinity value on DPP4 and α -G and luteolin-7-glucoside on GK and PTP-1B proteins. Based on the prediction of the best interactions for each target namely quercetin-3-O-rhamnoside, nicotiflorin, rhaponticin, luteolin-7-glucoside, chrysoeriol, rhapontigenin, isorhamnetin-3-O-galactoside, orientin, and isorhamnetin. ADME predictions show that flavonoid compounds from lamtoro namely chrysoeriol meet Lipinski requirements, do not diffuse on the brain barrier, not P-glycoprotein substrate and can be well metabolized.

Keyword : Antidiabetic, *Leucaena leucocephala*, *Trigonella foenum-graecum*, Molecular Docking