

INTISARI

WATI, W, 2019, MOLECULAR DOCKING DAN PREDIKSI ADME KANDUNGAN KIMIA DAUN SALAM (*Syzygium polyanthum*) DAN DUWET (*Syzygium cumini*) SEBAGAI ANTIDIABETES, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA

Dipeptidil peptidase-4 (DPP4), protein fosfatase-1B (PTP1B), α -glukosidase, dan glukokinase merupakan beberapa enzim yang mempengaruhi aktivitas antidiabetes. Ekstrak daun *Syzygium polyanthum* dan ekstrak *Syzygium cumini* telah dilaporkan memiliki aktivitas antidiabetes. Penelitian ini, bertujuan untuk memprediksi target molekul kandungan kimia dari ekstrak *Syzygium cumini* serta mempelajari interaksi kandungan tersebut dengan berbagai target makromolekul dari agen antidiabetes.

Docking molekuler semua ligan menggunakan program Autodock Vina di PyRx dan hasilnya disajikan sebagai nilai afinitas pengikatan (kkal/mol) ligan terhadap protein. Program PyMOL digunakan untuk memvisualisasikan 3D molekul dari penambatan konformasi dan interaksi ligan-protein. Farmakokinetik diprediksi menggunakan SwissADME.

Hasil docking molekuler dari tujuh belas senyawa dari ekstrak daun *S. polyanthum* menunjukkan bahwa skualena memiliki nilai afinitas pengikatan yang lebih tinggi terhadap glukokinase (9,1 kkal/mol) sementara ekstrak *S. cumini* menunjukkan bahwa delfinidin-3-gentiobiosida memiliki nilai afinitas pengikatan yang lebih tinggi terhadap enzim DPP4 (9,5 kkal/mol) dan enzim glukokinase (-8,5 kkal/mol), sedangkan asam elagik yang memiliki nilai afinitas pengikatan lebih tinggi pada enzim PTP1B (9,2 kkal/mol). Delfinidin-3-gentiobiosida memiliki absorpsi rendah di gastrointestinal. Namun, delfinidin-3-gentiobiosida melanggar tiga aturan Lipinski.

Kata Kunci: molecular docking, *Syzygium polyanthum*, *Syzygium cumini*, antidiabetes, AutoDock Vina, SwissADME.

ABSTRACT

WATI, W, 2019, ADME PREDICTION AND MOLECULAR DOCKING STUDY OF CHEMICAL CONSTITUENTS OF *Syzygium polyanthum* AND *Syzygium cumini* AS ANTIDIABETIC AGENTS, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA

Dipeptidyl peptidase-4 (DPP4), protein phosphatase-1B (PTP1B), glucokinase, α -glucosidase are enzymes that affect antidiabetic activity. *Syzygium polyanthum* leaf extract and *Syzygium cumini* herbs extract has been reported to have antidiabetic activity. This study, aimed to predict the molecular target of chemical constituents of *Syzygium polyanthum* leaf extract and *Syzygium cumini* herbs extract as well as study their interactions to be various macromolecular targets of antidiabetic agent.

Molecular docking of all ligands were using program Autodock Vina in PyRx and the results were presented as binding affinity values (kcal/mol) of ligand against protein. Program PyMOL were used to visualize the 3D molecular of docked conformation and ligand-protein interactions. Predicted pharmacokinetic using SwissADME.

Molecular docking results of seventeen compounds of *Syzygium polyanthum* leaf extract show that squalene having binding affinity values higher in *glucokinase* (-9.1 kcal/mol) while eleven compounds of *Syzygium cumini* herbs extract show that delphinidin-3-gentiobioside having binding affinity values higher in enzyme DPP-4 (-9.5 kcal/mol) and enzyme *glucokinase* (-8.5 kcal/mol), whereas ellagic acid having binding affinity values higher in enzyme PTP1B (-9.2 kcal/mol).

Keywords: molecular docking, *Syzygium polyanthum*, *Syzygium cumini*, antidiabetes, AutoDock Vina, SwissADME.