

INTISARI

LARAS, S, 2020, STUDI PENAMBATAN MOLEKUL KANDUNGAN KIMIA BUAH MAHKOTA DEWA (*Phaleria macrocarpa*)S SEBAGAI INHIBITOR α -AMILASE DAN α -GLUKOSIDASE, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Enzim α -amilase dan α -glukosidase berperan dalam hidrolisis pati menjadi glukosa. Ekstrak mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) dilaporkan memiliki aktivitas inhibisi terhadap enzim α -amilase dan α -glukosidase. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi model interaksi kandungan kimia mahkota dewa sebagai kandidat obat antidiabetes baru.

Preparasi dan optimasi struktur kandungan kimia mahkota dewa menggunakan ChemDraw, PubChem, dan Autodock Tools untuk enzim α -amilase dan α -glukosidase. Penambatan molekuler kandungan kimia mahkota dewa terhadap enzim α -amilase dan α -glukosidase menggunakan Autodock Vina didalam PyRx dan diperoleh nilai energi bebas Gibbs ikatan (ΔG_{bind}). PyMOL digunakan untuk memvisualisasikan konformasi 3D sisi aktif antara ligan terhadap makromolekul target.

Hasil penambatan molekuler kandungan kimia mahkota dewa terhadap enzim α -amilase dan enzim α -glukosidase menunjukkan bahwa naringin memiliki nilai ΔG_{bind} terbaik (-9,6 kkal/mol) dengan berikatan secara hidrogen pada residu asam amino penting Asp197 dan Glu233 dari makromolekul target α -amilase. Rutin menunjukkan nilai ΔG_{bind} terbaik terhadap enzim α -glukosidase (-9,4 kkal/mol) dengan berikatan secara hidrogen pada Asp542 dan membentuk interaksi van der Waals pada Asp443 yang keduanya merupakan residu asam amino penting dari makromolekul target.

Kata kunci: Penambatan molekul, *Phaleria macrocarpa*, α -amilase, α -glukosidase

ABSTRACT

LARAS, S. 2020. MOLECULAR DOCKING STUDY ON THE CONSTITUENTS OF GOD'S CROWN FRUIT (*Phaleria macrocarpa*) AS α -AMYLASE AND α -GLUCOSIDASE INHIBITORS, THESIS, FACULTY OF PHARMACY, UNIVERSITY OF SETIA BUDI, SURAKARTA.

The α -amylase and α -glucosidase play a role in the hydrolysis of starch into glucose. The god's crown extract (*Phaleria macrocarpa*) has been reported to have inhibitory activities against the α -amylase and α -glucosidase. This study aims to predict the interactions model of the god's crown chemical constituents as a candidate for new antidiabetic drugs.

Preparation and optimization of the chemical structure of the god's crown using ChemDraw, PubChem, and Autodock Tools for α -amylase and α -glucosidase enzymes. Docking molecular of the chemical constituents of the god's crown against α -amylase and α -glucosidase using Autodock Vina in PyRx and binding affinity (ΔG_{bind}). PyMOL is used to visualize active site 3D conformation between ligands and the macromolecular target.

The result of the molecular docking of the chemical constituents of the god's crown against the α -amylase and α -glucosidase showed that naringin has the best ΔG_{bind} value (-9.6 kcal/mol) by hydrogen bonding to the essential amino acid residue Asp197 and Glu233 of the α -amylase as a macromolecular target. Rutin showed the best ΔG_{bind} value against the α -glucosidase (-9.4 kcal/mol) by hydrogen bonding to the Asp542 and form the interaction of Van der Waals on the Asp443 which are both essential amino acid residues of the macromolecular target.

Keywords: Molecular docking, *Phaleria macrocarpa*, α -amylase, α -glucosidase