

ABSTRAK

VERASTI, D. E., 2021, ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA TANAMAN KAYU MANIS (*Cinnamomum burmanii* Nees & T. Nees) TERHADAP PROTEIN TARGET ANTIDIABETES

Beberapa penelitian membuktikan bahwa ekstrak kayu manis secara signifikan dapat mengurangi kadar gula darah puasa pada penderita DM2. Namun mekanisme kerjanya belum diketahui secara pasti. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi senyawa apa saja yang dapat berinteraksi dengan target molekuler antidiabetes dan memprediksi profil ADME dari senyawa dalam tanaman kayu manis.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah penambatan molekuler empat belas senyawa dari tanaman kayu manis terhadap protein target antidiabetes menggunakan *AutoDock Tools*. Preparasi ligan uji menggunakan *VegaZZ*, preparasi protein target menggunakan *Autodock Tools*, validasi *native ligand* dan protein target menggunakan *Autodock4*, serta visualisasi hasil penambatan menggunakan *PyMOL* dan *Discovery Studio Visualizer*. Hasil dari penambatan molekuler dilihat dari nilai energi ikatan yang terbentuk, kemiripan dengan asam amino dan tipe interaksinya dari *native ligand*. Semakin rendah nilai energi ikatan, maka kompleks yang terbentuk semakin stabil. Senyawa terbaik dipilih berdasarkan nilai energi ikatan yang terendah, kemudian dilakukan pengujian profil *druglikeness* dan farmakokinetik menggunakan *ADMETlab*.

MHCP, rutin, proantosianidin, prosianidin B2, dan kuersetin diprediksi memiliki interaksi terbaik dan memiliki afinitas lebih baik dari *native ligand* protein target aldose reduktase, glucokinase, PPAR-alfa, PTP-1B. MHCP dan kuersetin diprediksi memiliki sifat kemiripan obat berdasarkan aturan Lipinski dan MHCP merupakan senyawa yang memiliki profil farmakokinetik terbaik.

Kata kunci: *Cinnamomun burmanii*, penambatan molekuler, nilai energi ikatan, DM tipe 2, ADME

ABSTRACT

VERASTI, D.E., 2021, ANALYSIS OF MOLECULAR DOCKING CHEMICAL CONTENT OF CINNAMON PLANTS (*Cinnamomum burmanii* Nees & T. Nees) TO ANTIDIABETIC TARGET PROTEIN

Several studies have shown that cinnamon extract can significantly reduce fasting blood sugar levels in people with T2DM. However, the mechanism of action is not known with certainty. This study aims to predict what compounds can interact with antidiabetic molecular targets and predict the ADME profile of compounds in cinnamon plants.

The method used in this study was the molecular docking of fourteen compounds from the cinnamon plant to antidiabetic target proteins using AutoDock Tools. Preparation of test ligands was used VegaZZ, preparation of target proteins was used Autodock Tools, validation of native ligands and target proteins were used Autodock4, and visualization of tethering results was used PyMOL and Discovery Studio Visualizer. The result of molecular docking was seen from the value of the bond energy formed, the similarity with amino acids and the type of interaction of the native ligand. The lower the bond energy value, the more stable the complex formed. The best compound was selected based on the lowest bond energy value, then tested for druglikeness and pharmacokinetic profiles using ADMETlab.

MHCP, rutin, proanthocyanidin, procyanidin B2, and quercetin are predicted to have the best interaction and have better affinity than the native ligand target protein aldose reductase, glucokinase, PPAR-alpha, PTP-1B. MHCP and quercetin were predicted to have similar drug properties based on Lipinski's rules and MHCP was the compound that had the best pharmacokinetic profile.

Keywords: *Cinnamomun burmanii*, molecular docking, bond energy value, type 2 diabetes mellitus, ADME