

INTISARI

BULU, A.T.I. 2018. IDENTIFIKASI SENYAWA KIMIA EKSTRAK DAUN YACON (*Smallanthus sonchifolius*) SERTA PREDIKSI AFINITAS DAN POLA INTERAKSI TERHADAP ENZIM ALFA GLUKOSIDASE DAN RESEPTOR PPAR γ

Daun yacon merupakan tumbuhan asli dari pegunungan Andean, Peru yang diketahui mempunyai aktivitas sebagai antidiabetes. Tanaman ini mengandung senyawa fenolik dan turunannya yang mempunyai aktivitas antidiabetes. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui senyawa apa saja yang terkandung dalam fraksi/sub fraksi daun yacon dan mengetahui prediksi afinitas dan pola interaksi ligan senyawa tersebut terhadap enzim alfa glukosidase dan reseptor PPAR γ .

Penelitian ini adalah penelitian eksperimental laboratorium dengan menggunakan metode kromatografi dan spektrofotometri untuk pemisahan dan pemurnian dan *in silico* dengan *docking* molekuler untuk prediksi afinitas serta pola interaksi. Ekstrak etanol daun yacon di fraksinasi dengan fraksi cair partisi, KCV, Kromatografi kolom klasik dan HPLC selanjutnya diidentifikasi dengan ^1H -NMR dan ^{13}C -NMR. Protein uji yang dipakai adalah 2QMJ (alfa glukosidase) dan 5GTN (PPAR γ) dalam format .pdb yang diperoleh dari *Protein Data Bank*. Docking molekuler menggunakan program PyRx AutoDock Tools 4.2.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa fraksi/sub fraksi daun yacon mengandung senyawa metil luteonin ($\text{C}_{16}\text{H}_{12}\text{O}_6$) berdasarkan hasil ^1H NMR dan ^{13}C NMR. Hasil docking diperoleh nilai energi ikatan metil luteolin -6,69 kkal/mol terhadap 2QMJ dan -8,45 kkal/mol terhadap 5GTN. Afinitas dan pola interaksi metil luteolin cukup baik terhadap enzim alfa glukosidase dan reseptor PPAR γ dibandingkan dengan akarbosa dan pioglitazone.

Kata kunci: *Smallanthus sonchifolius*, antidiabetes, fenolik, *docking* molekuler, alfa glukosidase, PPAR γ .

ABSTRACT

BULU, A.T.I. 2018. IDENTIFICATION OF CHEMICAL COMPOUNDS OF YACON LEAF EXTRACT (*Smallanthus sonchifolius*) AND AFINITY PREDICTION AND INTERACTION PATTERNS ON ALPHA GLUCOSIDASE ANZIME AND PPAR γ RECEPTOR

Yacon leaves is a plant from Andean mountains, Peru which are known contains phenolic compounds and derivatives that have antidiabetic activity. The purpose of this study was to determine any compounds containing in the yacon leaf fraction/ sub-fraction and find out the prediction of affinity and ligand interaction patterns of these compounds to the alpha glucosidase enzyme and PPAR γ receptor.

This research is a laboratory experimental research using chromatography and spectroscopy methods for separation and purification and in silico with molecular docking for prediction of affinity and interaction patterns. Ethanol extract of yacon leaves was fractionated with partition liquid fraction, VLC, classic column chromatographi and HPLC then identification with ^1H -NMR and ^{13}C -NMR. The proteins test were used 2QMJ (alpha glucosidase) and 5GTN (PPAR γ) in the .pdb format obtained from the Protein Data Bank. Molecular docking using the PyRx program AutoDock Tools 4.2.

The results showed that the yacon leaf fraction / sub fraction contained methyl luteonin compounds ($\text{C}_{16}\text{H}_{12}\text{O}_6$) based on the ^1H -MNR and ^{13}C -NMR results. The docking results obtained the bond energy values of methyl luteolin are -6.69 kcal/mol against 2QMJ and -8.45kcal/mol against 5GTN. Affinity and interaction patterns of methyl luetolin are quite good for alpha glucosidase enzymes and PPAR γ receptors compared to acarbose and pioglitazone.

Keywords: *Smallanthus Sonchifolius*, antidiabetic, Phenolic, *docking* molekuler, alfa glukosidase, PPAR γ .