

**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL KANDUNGAN KIMIA BUAH
MAHKOTA DEWA (*Phaleria macrocarpa*) SEBAGAI INHIBITOR
 α -AMILASE DAN α -GLUKOSIDASE**



Oleh:

**Srikandi Laras
21154620A**

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS SETIA BUDI
SURAKARTA
2020**

**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL KANDUNGAN KIMIA BUAH
MAHKOTA DEWA (*Phaleria macrocarpa*) SEBAGAI INHIBITOR
 α -AMILASE DAN α -GLUKOSIDASE**

SKRIPSI

*Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat mencapai
derajat Sarjana Farmasi (S.Farm)
Program Studi Ilmu Farmasi pada Fakultas Farmasi
Universitas Setia Budi*

Oleh:

**Srikandi Laras
21154620A**

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS SETIA BUDI
SURAKARTA
2020**

PENGESAHAN SKRIPSI

berjudul:

**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL KANDUNGAN KIMIA BUAH MAHKOTA DEWA
(*Phaleria macrocarpa*) SEBAGAI INHIBITOR
 α -GLUKOSIDASE DAN α -AMILASE**

Oleh:

**Srikandi Laras
21154620A**

Dipertahankan di hadapan panitia penguji skripsi
Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi
Pada tanggal : 6 Agustus 2020

Mengetahui,
Fakultas Farmasi
Universitas Setia Budi

Dekan,



Prof. Dr. Srikandi Laras, Oetari, SU, MM., MSc.,

Pembimbing

Dr. Apt. Rina Herowati, M.Si.

Pembimbing Pendamping

Dr. Nitisari Widayanti, S.Si., M.Si.

Penguji:

1. Dr. Apt. Ismi Rahmawati, M.Si.
2. Apt. Vivin Nopiyanti, S.Farm., M.Sc.
3. Apt. Meta Kartika Untari, M.Sc.
4. Dr. Apt. Rina Herowati, M.Si.

1.....

2.....

3.....

2.....

4.....

PERSEMBAHAN

Bismillahirrahmanirrahim

Saya persembahkan karya sederhana ini kepada:

- ♥ The self that has risen and fights the ignorance and laziness. You are great, until this moment I will say I am proud of you. You are the first person who will help yourself, so stay in the spirit. Hopefully you can become a better person in the future. I believe that you are amazing. I love myself.
- ♥ My parents who have suggested me to take this major. I love this major, even though I was forced to. Sorry for not being able to finish college on time, but I will take responsibility for it as a form of my devotion. Hopefully you guys can be a little happy because of this. I love you.
- ♥ My one and only lil bro, there is no impression for you, but you have to know that I love you, I honestly love you, even though I do not always show it.
- ♥ Dosen pembimbing Ibu Dr. Apt. Rina Herowati, M.Si dan Ibu Dr. Nuraini Harmastuti, S.Si., M.Si yang membimbing saya dalam menyelesaikan penelitian ini.
- ♥ Dosen pembimbing akademik Ibu Dr. Ana Indrayati, M.Si yang telah membimbing saya dari awal hingga akhir masa perkuliahan.
- ♥ Sahabat Mas Anggi yang dengan sangat sabar membantu saya dalam menyelesaikan penelitian ini.
- ♥ Sahabat “BS” Nendika dan Julinar.
- ♥ Sahabat “SLK” Rangga, Dafid, Henry, Akif, Iyan, Minah, Dita, Sheila, Liani, dan Liyna.
- ♥ Sahabat “MPO2” Kinanthi, Arnolda, Devi, Putri, dan Olivia.
- ♥ Sahabat di BLM periode 2017/2018 Choirunnisa dan Anita.
- ♥ Sahabat “NM” Risha, Ifdah, Desi, Citra, Selvi, dan Intan.
- ♥ Sahabat “PA” Wati, Verra, Ayu, dan Juju.
- ♥ Sahabat Bernadethi dan Hasfie
- ♥ Sahabat “GC” Rosania, Meli, dan Nabilla.

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi ini adalah hasil pekerjaan saya sendiri dan tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu Perguruan Tinggi dan sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Apabila skripsi ini merupakan jiplakan dari penelitian/karya ilmiah/skripsi orang lain, maka saya siap menerima sanksi, baik secara akademis maupun hukum.

Surakarta, 6 Agustus 2020

Yang menyatakan



Srikandi Laras

KATA PENGANTAR


Segala puji dan syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT atas rahmat dan karunia-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul **“STUDI PENAMBATAN MOLEKUL KANDUNGAN KIMIA BUAH MAHKOTA DEWA (*Phaleria macrocarpa*) SEBAGAI INHIBITOR α -AMILASE DAN α -GLUKOSIDASE”**. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat mencapai gelar Sarjana dari Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi.

Penulis menyadari bahwa keberhasilan penelitian skripsi ini tidak lepas dari bimbingan dan dukungan banyak pihak. Oleh karena itu, pada kesempatan kali ini penulis mengucapkan terima kasih kepada :

1. Dr. Ir. Djoni Tarigan, MBA.. selaku Rektor Universitas Setia Budi.
2. Prof. Dr. R.A. Oetari, SU., MM., M.Sc., Apt, selaku Dekan Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi.
3. Dr. Apt. Rina Herowati, S.Si., M.Si, selaku pembimbing utama yang telah memberikan bimbingan, pengarahan, dan kesabaran selama penulisan skripsi ini.
4. Dr. Nuraini Harmastuti, S.Si., M.Si, selaku pembimbing pendamping yang telah memberikan bimbingan, pengarahan, dan kesabaran selama penulisan skripsi ini.
5. Tim penguji skripsi yang telah memberikan saran dan kritik untuk perbaikan skripsi ini.
6. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu yang telah membantu tersusunnya skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih banyak kekurangan. Oleh karena itu, dengan segala kerendahan hati, penulis sangat mengharapkan kritik dan saran yang membangun demi kesempurnaan skripsi ini. Penulis berharap semoga skripsi ini dapat memberi sumbangan pengetahuan dan perkembangan khususnya di bidang farmasi, Universitas Setia Budi Surakarta dan pembaca pada umumnya.

Surakarta, 6 Agustus 2019


Penyusun

Type text here

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
PENGESAHAN SKRIPSI	iii
PERSEMBAHAN.....	iv
PERNYATAAN	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiii
INTISARI.....	xiv
ABSTRACT	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	4
C. Tujuan Penelitian	4
D. Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	6
A. Diabetes Melitus	6
1. Definisi Diabetes Melitus	6
2. Klasifikasi dan Patofisiologi Diabetes Melitus	6
2.1 DM tipe I.	7
2.2 DM tipe II.	8
2.3 DM gestasional.	8
2.4 DM tipe lain.	9
3. Komplikasi Diabetes Melitus.....	9
3.1 Hipoglikemia.....	9
3.2 Komplikasi makrovaskular.	10
3.3 Komplikasi mikrovaskular	10
4. Terapi Diabetes Melitus (DM).....	10
4.1 Terapi non farmakologi.	11
4.2 Terapi farmakologi.	11

5.	Gejala-gejala Diabetes Melitus	17
B.	Tanaman Mahkota Dewa.....	17
1.	Sistematika Tanaman	17
2.	Nama Lain.....	17
3.	Morfologi Tanaman.....	17
4.	Kandungan Kimia Tanaman	18
5.	Kegunaan Tanaman	32
C.	Enzim α -Amilase dan α -Glukosidase.....	32
1.	α -amilase.....	32
2.	α -glukosidase	33
D.	Makromolekul, Ligan, dan Asam Amino	34
1.	Makromolekul.....	34
2.	Ligan.....	35
3.	Asam Amino	35
E.	Interaksi Ikatan.....	38
1.	Ikatan Ion	38
2.	Ikatan Hidrogen.....	38
3.	Ikatan Van Der Waals	39
4.	Ikatan Kovalen	39
5.	Ikatan Dipol-Dipol	40
F.	Pemrograman dan Penambatan Molekuler.....	40
1.	PubChem.....	40
2.	ChemDraw	40
3.	The Prodrgr Server	41
4.	Discovery Studio	41
5.	Protein Data Bank	41
6.	Autodock.....	42
7.	Autodock Vina	42
8.	PyMOL	42
9.	Penambatan Molekuler	43
G.	Landasan Teori.....	44
H.	Hipotesis	47
 BAB III METODOLOGI PENELITIAN		 48
A.	Populasi dan Sampel	48
B.	Variabel Penelitian.....	48
1.	Identifikasi Variabel Utama.....	48
2.	Klasifikasi Variabel Utama.....	48
3.	Definisi Operasional Variabel Utama	49
C.	Alat dan Bahan.....	49
1.	Alat	49
2.	Bahan.....	50
D.	Cara Kerja.....	50
1.	Penyiapan Struktur Molekul α - glukosidase dan α -amilase ...	50
1.1	Penyiapan struktur molekul.	50
1.2	Pemisahan residu dari molekul	50

1.3	Optimasi struktur molekul.	50
1.4	Penentuan grid box dari molekul.	51
2.	Penyiapan Struktur Ligan	51
2.1	Penggambaran struktur ligan.	51
2.2	Preparasi struktur ligan. Preparasi struktur ligan menggunakan web server	51
3.	Validasi Metode Penambatan Molekuler	51
4.	Penambatan Molekul dengan Autodock Vina	51
4.1	Penambatan molekul dengan Autodock Vina.....	51
4.2	Analisis hasil penambatan molekul.....	51
5.	Analisis Hasil Penambatan Molekuler	52
5.1	Autodock tools.	52
5.2	PyMOL.	52
E.	Skema Penelitian.....	52
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		53
A.	Penyiapan Struktur Makromolekul	53
B.	Penyiapan Struktur Ligan Uji	53
C.	Validasi Metode Penambatan Molekul	54
D.	Penambatan Molekuler dengan Autodock Vina	55
E.	Analisa dan Visualisasi Hasil	56
1.	Enzim α -amilase (4W93).....	57
2.	Enzim α -glukosidase	64
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN		72
A.	Kesimpulan	72
B.	Saran.....	72
DAFTAR PUSTAKA		73
LAMPIRAN		78

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
1. Mekanisme kerja obat golongan sulfonilurea.....	13
2. Akarbosa 2D	16
3. Akarbosa 3D	16
4. Tanaman Mahkota Dewa.....	17
5. Interaksi ligan natif dan residu asam amino	33
6. Interaksi ligan natif dan residu asam amino	34
7. Hidrofobik, asam amino alifatik	36
8. Hidrofobik, asam amino aromatik	36
9. Polar, asam amino bermuatan.....	37
10. Polar, asam amino tak bermuatan	37
11. Konsep dasar penambatan molekul.....	43
12. Skema Penelitian.....	52
13. Interaksi antara ligan natif terhadap enzim α -amilase	59
14. Interaksi antara kontrol positif terhadap enzim α -amilase	60
15. Interaksi antara naringin terhadap enzim α -amilase	61
16. Interaksi antara fevikordin A-glukosida terhadap enzim α -amilase	62
17. Interaksi antara desasetilfevikordin A terhadap enzim α -amilase	63
18. Interaksi antara rutin terhadap enzim α -amilase	64
19. Interaksi antara rutin terhadap enzim α -glukosidase	67
20. Interaksi antara kaempferol 3- β -D-glukopiranosida terhadap enzim α -glukosidase	68
21. Interaksi antara naringin terhadap enzim α -glukosidase	69
22. Interaksi antara falerin terhadap enzim α -glukosidase.....	70
23. Interaksi antara ligan natif terhadap enzim α -glukosidase	71

DAFTAR TABEL

	Halaman
1. Kandungan kimia dalam mahkota dewa (<i>Phaleria macrocarpa</i>).....	19
2. Nilai koordinat pusat massa struktur dan dimensi	54
3. Nilai $\Delta G_{\text{binding}}$ (kkal/mol) Senyawa Kimia Mahkota Dewa (<i>Phaleria macrocarpa</i>)	55
4. Hasil terbaik penambatan molekuler dan residu interaksi.....	58
5. Hasil terbaik penambatan molekul dan residu interaksi	66

DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
1. Struktur Tiga Dimensi Makromolekul Target	79
2. Penyiapan Struktur Makromolekul Target dan Ligan Uji.....	80
3. Validasi Metode Penambatan Molekuler	83

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 side 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

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Penyakit diabetes melitus (DM) telah menjadi salah satu masalah kesehatan masyarakat global dan menurut *International Diabetes Federation* (IDF) pemutakhiran ke-8 tahun 2017, jumlah penderitanya semakin bertambah. Lebih dari 425 juta orang di seluruh dunia mengalami DM, 4 juta orang meninggal akibat penyakit metabolik ini dan 727 miliar dolar Amerika dikeluarkan untuk pengobatannya (IDF 2017). Pada tahun 2013 terdapat 352 juta orang, tahun 2015 terdapat 382 juta orang di seluruh dunia yang mengidap DM dan diperkirakan akan meningkat pada tahun 2045 menjadi 629 juta orang. Perkiraan penduduk Indonesia yang mengidap DM pada tahun 2013 adalah sebesar 8,5 juta orang, tahun 2017 sebesar 10,3 juta orang dan pada tahun 2045 diperkirakan terdapat 16,7 juta orang. Indonesia merupakan salah satu negara dengan jumlah kejadian DM yang tinggi, yakni urutan ke 6 di dunia setelah Cina, India, Amerika Serikat, Brazil, dan Meksiko (IDF 2017).

DM merupakan penyakit degeneratif yang jumlah penderitanya selalu meningkat dari tahun ke tahun. Peningkatan penderita DM untuk 20 sampai 30 tahun mendatang disebabkan oleh peningkatan kemakmuran, perubahan pola makan, demografi dan urbanisasi. Perubahan pola makan menjadi pola makan yang berisiko, seperti konsumsi karbohidrat dan lemak tinggi, kurangnya aktivitas fisik yang mengakibatkan kegemukan dan hipertensi, selain itu ada faktor risiko yang tidak bisa dikendalikan seperti umur, jenis kelamin faktor genetik yang cukup berpengaruh dalam meningkatkan angka kejadian (Edward dan Yerizel 2009).

Lebih dari 400 juta orang hidup dengan diabetes (WHO 2014). DM tipe 2 adalah masalah kesehatan masyarakat yang terbesar, dan lebih dari 90% masalah kesehatan masyarakat adalah kasus diabetes. DM tipe 2 adalah penyakit yang berbahaya dan awalnya tanpa gejala, sifat dari penyakit ini menyebabkan pasien tidak memeriksakan masalah kesehatannya sejak dini, sehingga 30-85% kasus

DM tipe 2 tidak terdiagnosis. Pada saat terdiagnosis, sekitar 20% pasien telah mengalami komplikasi penyakit (Amod *et al.* 2012).

Terapi farmakoterapi untuk diabetes terdiri dari obat antidiabetik oral dan atau insulin. Obat-obat antidiabetik oral ini terdiri dari beberapa golongan berdasarkan mekanisme kerjanya, yaitu sulfonilurea (meningkatkan sekresi insulin), biguanid (mengurangi glukoneogenesis hepatic, meningkatkan sensitivitas insulin), tiazolidindion (meningkatkan sensitivitas insulin), penghambat α -glukosidase, dan penghambat *glucagon like peptide-1* (GLP-1). Namun, penggunaan antidiabetes oral terbatas karena efek samping yang merugikan termasuk reaksi hematologikal, kutan dan gastrointestinal, koma, hipoglikemik, gangguan fungsi hati dan ginjal (Alarcon 2000). Penelitian untuk menemukan senyawa obat baru yang memiliki efek antidiabetes dengan efektivitas yang lebih baik namun efek samping yang ditimbulkan jauh lebih ringan dilakukan untuk mengatasi permasalahan tersebut.

Inhibitor α -amilase dan α -glukosidase merupakan salah satu agen antidiabetik yang bekerja dengan cara menghambat kerja enzim amilase dan glukosidase. Inhibitor sintesis untuk α -amilase dan α -glukosidase yang banyak digunakan untuk penanganan pasien DM tipe 2 dilaporkan menyebabkan berbagai efek samping (Feng *et al.* 2011). Beberapa inhibitor yang tersedia di pasaran dan banyak digunakan adalah akarbosa yang diketahui menghambat secara luas glukosidase sehingga sifat non spesifik terhadap target dari obat-obatan tersebut diketahui memiliki efek samping gangguan pencernaan, kembung, diare, dan flatulen (Mugiyanto 2017) oleh karena itu, pengembangan obat inhibitor enzim glukosidase menjadi target yang menarik sebagai terapi pengobatan DM (Zuhro *et al.* 2016).

Mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) sebagai obat asli Indonesia banyak digunakan untuk berbagai macam penyakit diantaranya sebagai antidiabetes (Edward dan Yerizel 2009). Penelitian *in vitro* yang dilakukan oleh Sugiwati *et al.* (2006) bahwa mahkota dewa memberikan efek hipoglikemik sebagai inhibitor enzim α -glukosidase terutama ekstrak n-butanol buah muda dan yang sudah masak, ekstrak etil asetat, dan methanol, sedangkan Ali *et. al* (2012) melaporkan

bahwa ekstrak metanol mahkota dewa dapat menghambat enzim α -glukosidase 20% lebih tinggi dari akarbosa. Sellamuthu (2009) pernah melaporkan bahwa senyawa flavonoid khas yakni mangiferin berpotensi sebagai antidiabetes, hal ini dikuatkan oleh penelitian yang dilakukan oleh Easmin *et al.* (2016) bahwa flavonoid pada mahkota dewa dapat menghambat α -glukosidase. Ali *et al.* (2012) menggunakan analisis LC-MS menunjukkan bahwa tingginya jumlah mangiferin pada buah mahkota dewa menunjukkan aktivitas antidiabetes pada tikus dengan kondisi diabetes. Sedangkan penelitian yang dilakukan oleh Fiana dan Oktaria (2016) kandungan tertinggi pada buah mahkota dewa adalah saponin, dimana mekanisme saponin adalah sebagai inhibitor enzim α -glukosidase yang dapat menurunkan kadar gula darah dari tikus yang diinduksi glukosa.

Pengembangan obat modern saat ini berorientasi pada target yang spesifik, yakni berupa makromolekul, khususnya protein yang terlibat langsung pada patogenesis suatu penyakit. Semakin berkembang ilmu dan teknologi, semakin banyak pengetahuan yang lebih rinci mengenai patogenesis molekuler, dan juga kemampuan untuk mengidentifikasi protein-protein yang strategis sebagai target pengobatan. Teknik-teknik yang dikembangkan pun semakin banyak dan disertai akurasi yang tinggi terhadap studi mekanisme interaksi obat dan reseptor spesifik. Salah satu teknik yang banyak dikembangkan saat ini adalah teknik penambatan yang menggunakan perangkat lunak berbasis komputer (Purnomo 2011). Sehingga teknik penambatan dapat mengefisiensi biaya dan waktu dalam penemuan dan pengembangan obat baru.

Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui penghambatan oleh kandungan kimia buah mahkota dewa, penelitian sebelumnya yang dilakukan oleh Farkhani (2012) dan Rachmania (2015) menggunakan enzim α -glukosidase pada manusia dengan kode PDB 2QMJ dan 4W93 untuk enzim α -amilase pada manusia yang sebelumnya telah dilakukan oleh Taha *et al.* (2018). Penelitian dilakukan dengan pendekatan *in silico* menggunakan metode komputasi kimia yang dapat memprediksikan potensi kandidat obat baru terhadap suatu penyakit dengan biaya efektif dan waktu yang cepat melalui penapisan virtual atau secara komputasi (Arwansyah 2014). Komputer dilengkapi perangkat lunak penambatan molekul

yang terdapat dalam program Autodock Vina. Program Autodock Vina dipilih karena tidak berbayar, mudah dioperasikan, akurat, memiliki tingkat error yang rendah dan hasilnya dapat dipercaya (Trott dan Olson 2010).

B. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dipaparkan, maka rumusan masalah dari penelitian ini adalah.

1. Apakah kandungan kimia dari buah mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) memiliki interaksi terhadap enzim α -amilase dan α -glukosidase yang dianalisis dengan menggunakan teknik penambatan molekul Autodock Vina sebagai perangkat lunak?
2. Bagaimana data prediksi model interaksi kandungan kimia dari buah mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) terhadap enzim α -amilase dan α -glukosidase yang dapat dijadikan sebagai kandidat obat antidiabetes baru?

C. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah yang telah dipaparkan, maka tujuan dari penelitian ini adalah.

1. Untuk mengetahui kandungan kimia dari buah mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) memiliki interaksi terhadap enzim α -amilase dan α -glukosidase yang dianalisis dengan menggunakan teknik penambatan molekuler Autodock Vina sebagai perangkat lunak.
2. Untuk mengetahui data prediksi model interaksi kandungan kimia dari buah mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) terhadap enzim α -amilase dan α -glukosidase yang dapat dijadikan sebagai kandidat obat antidiabetes baru.

D. Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah mengetahui kandungan kimia kimia yang terkandung dalam mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) yang diprediksi

sebagai inhibitor enzim α -amilase dan α -glukosidase sehingga dapat memberikan informasi dalam perancangan obat antidiabetes baru.