

ABSTRACT

Aprilia Dwi Astuti. B.1810792. The potential active compound extract of red dragon fruit (*hylocereus polyrhizus*) peel as α -glukosidase inhibitor by *in silico*. Supervised by M. Fakhri Kurniawan dan Erna Puspasari.

Diabetes melitus is one of the metabolic diseases caused by a disorder of the pancreatic beta cell. Pancreatic beta cells themselves play a role in metabolizing insulin in the body, thus becoming less insulin. This condition causes hyperglycemia, which is high levels of glucose in the blood. The decrease in blood sugar can be inhibited by the activity of the α -glukosidase enzyme. The study was aimed to examine the potential of active compounds extracted from red dragon fruit peel as α -glukosidase inhibitor based the rule of lipinski (rule of five), Gibbs free energy (ΔG), RMSD value (Root Mean Square Deviation), and the interaction between amino acid residue with the active side of the receptor. Docking was done on 33 active compounds (21 compounds from 70% ethanol extracts, 4 compounds from 82% ethanol extracts, and 8 compounds from the aqueous extract). These results indicate that there are 14 selected compounds that fulfills the five Lipinski rules. From these results, 6 compounds selected on molecular docking that have the potential as α -glukosidase enzyme inhibitor, especially the compound 3-3'-Di-O-methylellagic acid from aqueous extracts that fulfills the five Lipinski rules and is predicted to have the highest potential to show the highest activity as α -glukosidase inhibitor because it has a bond-free energy Gibbs of -6.8, RMSD value of 0.059, the same hydrogen bond with the validation ligand (TYR³⁶⁰) and hydrophobic bonds (TYR³⁶⁰, HIS⁷¹⁷, ARG⁶⁰⁸, GLY³⁵⁹, ARG⁶⁰⁸, VAL⁷¹⁸, and LEU⁸⁶⁸).

Key words: diabetes, α -glukosidase enzyme, red dragon fruit peel, *in silico*

ABSTRAK

Aprilia Dwi Astuti. B.1810792. Potensi Senyawa Aktif Ekstrak Kulit Buah Naga Merah (*Hylocereus polyrhizus*) sebagai Inhibitor Enzim α -Glukosidase secara *In Silico*. Di bawah bimbingan M. Fakhri Kurniawan dan Erna Puspasari.

Diabetes melitus merupakan salah satu penyakit metabolik yang disebabkan oleh gangguan pada sel beta pankreas. Sel beta pankreas berperan dalam metabolisme insulin dalam tubuh, sehingga insulin menjadi lebih sedikit. Kondisi ini menyebabkan hiperglikemia, yaitu tingginya kadar glukosa dalam darah. Penurunan gula darah dapat dilakukan dengan menghambat aktivitas enzim α -glukosidase. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi senyawa aktif ekstrak kulit buah naga merah sebagai inhibitor α -glukosidase berdasarkan aturan lipinski (*rule of five*), energi bebas Gibbs (ΔG), nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*), dan interaksi residu asam amino dengan sisi aktif reseptor. Docking dilakukan pada 33 senyawa aktif (21 senyawa dari ekstrak etanol 70%, 4 senyawa dari ekstrak etanol 82%, dan 8 senyawa dari ekstrak air). Hasil ini menunjukkan bahwa terdapat 14 senyawa terpilih yang memenuhi aturan Lipinski. Dari hasil tersebut didapatkan 6 senyawa terpilih berdasarkan penambatan molekul yang berpotensi sebagai inhibitor enzim α -glukosidase, khususnya pada senyawa 3-3'-*Di-O-methylelagic acid* dari ekstrak pelarut air yang memenuhi kelima aturan Lipinski dan diprediksi paling berpotensi menunjukkan aktivitas tertinggi sebagai inhibitor α -glukosidase karena memiliki energi ikatan bebas Gibbs sebesar -6.8, nilai RMSD sebesar 0,059, serta ikatan hidrogen yang sama dengan ligan validasi (TYR³⁶⁰) dan ikatan hidrofobik (TYR³⁶⁰, HIS⁷¹⁷, ARG⁶⁰⁸, GLY³⁵⁹, ARG⁶⁰⁸, VAL⁷¹⁸, dan LEU⁸⁶⁸).

Kata Kunci: diabetes, enzim α -glukosidase, kulit buah naga merah, *in silico*