

ABSTRACT

Amelya Putri Zamzami. B1710094. *Potency of Banana Peel Extract (Musa paradisiaca) as Alpha Glukosidase Inhibitor by In Silico. Supervised by Titi Rohmayanti dan Tiana Fitrilia.*

Diabetes mellitus (DM) occurs because of imbalance transport sugar into cells, storage of sugar in the liver and excretion sugar from the liver so that blood sugar increases and come out with urine and causes hiperglicemic. Blood sugar can be decreased by inhibiting the activity of the enzyme alpha glukosidase. This research was designed to study potency banana peel extract as alpha glukosidase inhibitor using molecular docking method based on the free energy Gibbs binding value (ΔG), RSMD (Root Mean Square Deviation) value, lipinski's rule, interactions with the amino acid residues to the active site of the receptor by in silico method. The result of the molecular docking banana peel extract showed that RSMD values $\leq 2,5 \text{ \AA}$ with the best compound is 1,2-Benzenedicarboxylic acid mono (2-ethylhexylester) ($0,051 \text{ \AA}$). In addition, molecular docking shows that the value of bond-free energy (ΔG) produces values between $3,1 \text{ kkal/mol}$ to $-6,4 \text{ kkal/mol}$ which lower than validation ligand ($-2,4 \text{ kkal/mol}$). The docking results showed that banana peel ligand interactions with the receptors have the best hydrogen bonds are 1,2-Benzenedicarboxylic acid mono (2-ethylhexylester) in the amino acid groups LEU³⁵⁵, ARG⁶⁰⁸, TYR³⁶⁰ and addition hidrophobic bonds in the amino acid groups TYR³⁶⁰. The stability of the banana peel extract compound is predicted to be quite stable which is supported by the addition of hydrophobic bonds and electrostatic bonds.

Keywords: *banana peel extract, diabetes mellitus, α -glucosidase enzyme, in silico*

ABSTRAK

Amelya Putri Zamzami. B1710094. Potensi Ekstrak Kulit Pisang (*Musa paradisiaca*) sebagai Inhibitor α -Glukosidase secara In Silico. Di bawah bimbingan Titi Rohmayanti dan Tiana Fitrilia.

Diabetes melitus (DM) terjadi karena tidak seimbangnya jumlah transportasi gula ke dalam sel, penyimpanan gula di dalam hati, dan pengeluaran gula dari hati sehingga gula darah meningkat dan ikut terbawa keluar bersama urin sehingga urin mengandung banyak gula. Penurunan gula darah dapat dilakukan dengan menghambat aktivitas enzim α -glukosidase. Penelitian ini dirancang untuk mempelajari potensi ekstrak kulit pisang sebagai inhibitor enzim α -glukosidase dengan metode penambatan molekul berdasarkan nilai energi ikatan bebas Gibbs (ΔG), nilai RMSD, aturan lipinski, dan interaksi residu asam amino dengan sisi aktif reseptor secara *in silico*. Hasil penambatan senyawa ekstrak kulit pisang memiliki nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*) $\leq 2,5 \text{ \AA}$ dengan senyawa yang paling baik adalah *1,2-Benzenedicarboxylic acid mono (2-ethylhexylester)* ($0,051 \text{ \AA}$). Selain itu, nilai energi ikatan bebas Gibbs (ΔG) menghasilkan nilai antara $-3,1 \text{ kkal/mol}$ hingga $-6,4 \text{ kkal/mol}$ yang lebih rendah dari ligan 7 validasi ($-2,4 \text{ kkal/mol}$). Dari hasil penambatan menunjukkan interaksi ligan ekstrak kulit pisang terhadap reseptor memiliki ikatan hidrogen yang paling baik adalah *1,2-Benzenedicarboxylic acid mono (2-ethylhexylester)* pada gugus asam amino LEU³⁵⁵, ARG⁶⁰⁸, TYR³⁶⁰ dengan tambahan ikatan hidrofobik TYR³⁶⁰. Kestabilan ikatan senyawa ekstrak kulit pisang diprediksikan cukup stabil yang ditunjang dengan ditambahnya ikatan hidrofobik dan ikatan elektrostatik.

Kata Kunci: ekstrak kulit pisang, diabetes melitus, enzim α -glukosidase, *in silico*

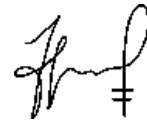
Judul : Potensi Ekstrak Kulit Pisang (*Musa paradisiaca*)
sebagai Inhibitor α -Glukosidase secara In Silico
Nama : Amelya Putri Zamzami
NIM : B.1710094
Jurusan : Teknologi Pangan
Fakultas : Fakultas Ilmu Pangan Halal

Disetujui Oleh,



Titi Rohmavanti, S.Si., M.Si

NPP. 213870766



Tiana Fitrilia, S.Pd., M.Si

NPP. 213870707

Disahkan Oleh,
Dekan Fakultas Ilmu Pangan Halal
Universitas Djuanda Bogor



H. Amar Ma'ruf, Ir., M.Si

NPP. 213870080

Tanggal Lulus : 10 Maret 2021

SURAT PERNYATAAN ORISINALITAS

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Amelya Putri Zamzami
Nomor Induk Mahasiswa (NIM) : B.1710094
Program Studi : Teknologi Pangan dan Gizi
Fakultas : Ilmu Pangan Halal
Jenis Karya Ilmiah : Skripsi
Alamat : Jl. Lodaya No. 34 RT 02/13, Kel. Ranga
Mekar, Kec. Bogor Selatan, Bogor.

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa Skripsi yang saya buat ini dengan judul : **Potensi Ekstrak Kulit Pisang (*Musa paradisiaca*) sebagai Inhibitor α -Glukosidase secara In Silico**. Adalah **karya saya sendiri** dan semua sumber, baik yang dikutip maupun yang dirujuk telah saya nyatakan dengan sebenar-benarnya. Demikian surat pernyataan ini saya buat dengan sesungguhnya dan dipergunakan sebagaimana mestinya.

Dibuat di : Bogor

Pada Tanggal : 10 Maret 2021

Yang membuat Pernyataan,



(Amelya Putri Zamzami)

**SURAT PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA
ILMIAH UNTUK KEPENTINGAN PENGEMBANGAN
ILMU PENGETAHUAN (AKADEMISI)**

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama Lengkap : Amelya Putri Zamzami
Tempat Tanggal Lahir : Jakarta, 11 November 1999
Nomor KTP (NIK) : 3271015111990021
Nomor Induk Mahasiswa (NIM) : B.1710094
Program Studi : Teknologi Pangan dan Gizi
Fakultas : Ilmu Pangan Halal
Jenis Karya Ilmiah : Skripsi

Untuk pengembangan ilmu pengetahuan, maka saya **menyetujui** untuk memberikan kepada Universitas Djuanda Bogor **Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif** beserta perangkat yang ada (jika diperlukan) atas karya ilmiah saya yang berjudul :

**“Potensi Ekstrak Kulit Pisang (*Musa paradisiaca*) sebagai Inhibitor α -
Glukosidase secara *In Silico*”**

Dengan pemberian Hak Bebas Royalti Non-eksklusif ini, maka Universitas Djuanda Bogor berhak menyimpan mengalihmedia (atau dalam bentuk lainnya), mengelola dalam bentuk pangkalan data, merawat dan mempublikasikan Skripsi **tanpa seizin saya**, dan tetap mencantumkan nama saya dan pembimbing Skripsi tersebut.

Demikian surat pernyataan ini saya buat dengan sesungguhnya, tanpa ada tekanan dari pihak manapun juga. Terima kasih.

Dibuat di : Bogor
Pada Tanggal : 10 Maret 2021
Yang membuat Pernyataan,



(Amelya Putri Zamzami)

RIWAYAT HIDUP

Penulis dilahirkan pada tanggal 11 November 1999 di Kecamatan Cempaka Putih, Jakarta Pusat, Provinsi DKI Jakarta. Putri pertama dari 3 bersaudara dari pasangan bapak Nurzamzam dan ibu Ernawati.

Penulis menempuh jenjang pendidikan formal di SDN Sumur Baru 14 Pagi dari tahun 2005-2007 lalu pindah ke SDN Pamoyanan 3 Bogor dari tahun 2008-2012. Pada tahun 2012 masuk ke SMP Negeri 9 Bogor sampai tahun 2014, kemudian melanjutkan ke SMA Negeri 4 Bogor sampai tahun 2017. Pada tahun 2017 penulis terdaftar sebagai mahasiswa program strata satu (S1) jurusan teknologi pangan dan gizi di Fakultas Ilmu Pangan Halal Universitas Djuanda Bogor.

Semasa kuliah penulis aktif sebagai Staff Departemen Eksternal Badan Eksekutif Mahasiswa (BEM) Universitas Djuanda Bogor pada tahun 2018-2019, sekretaris II Ikatan Mahasiswa Peduli Halal (IMAPELA) Regional Bogor pada tahun 2018-2019, Asisten Praktikum Pengetahuan Bahan Pangan dan Mikrobiologi pada tahun 2019, dan Asisten Dosen Bahasa Inggris pada tahun 2020. Selain itu, penulis juga pernah melakukan kegiatan Praktik Kerja Lapangan di PT. Jakarana Tama-Bogor.

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kehadiran Allah *Subhanahu wa Ta'ala* berkat rahmat, petunjuk dan hidayah-Nya penulis dapat menyelesaikan usulan penelitian ini. Shalawat serta salam penulis juga panjatkan kepada junjungan besar Nabi Muhammad *shallallaahu 'alaihi wasallam* beserta keluarga dan sahabatnya hingga akhir jaman. Sehingga, skripsi yang berjudul **“Potensi Ekstrak Kulit Pisang (*Musa paradisiaca*) sebagai Inhibitor α -Glukosidase secara In Silico”** dapat diselesaikan. Pada kesempatan ini penulis mengucapkan terimakasih kepada:

1. Bogor Bapak H. Amar Ma'ruf, Ir., M.Siselaku dekan Fakultas Ilmu Pangan Halal, Universitas Djuanda Bogor.
2. Titi Rohmayanti, S.Si., M.Si selaku pembimbing Utama yang telah meluangkan waktu untuk membimbing dan memberikan pengarahan serta masukan kepada penulis dalam pelaksanaan penelitian skripsi ini.
3. Ibu Tiana Fitrillia, S.Pd., M.Si selaku pembimbing Pendamping yang telah meluangkan waktu untuk membimbing dan memberikan pengarahan serta masukan kepada penulis dalam pelaksanaan penelitian skripsi ini.

Terima kasih atas segala bimbingan, arahan dan pengorbanan yang diberikan kepada penulis dalam menyusun skripsi ini. Semoga skripsi yang penulis susun ini dapat bermanfaat khususnya bagi penulis sendiri dan bagi semua pihak dan yang memerlukan informasi dalam skripsi ini.

Bogor, 10 Maret 2021

Penulis

UCAPAN TERIMA KASIH

Dalam perjalanan pendidikan sampai laporan skripsi ini terselesaikan, penulis menyadari banyak pihak yang membantu baik moril, materil maupun do'anya. Oleh karena itu pada kesempatan ini saya sampaikan terimakasih kepada:

1. Allah *Subhanahu wa Ta'ala* karena atas karunia-Nya *Alhamdulillah* penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan lancar.
2. Orang tua dan keluarga yang telah membantu dengan segenap do'a dan dukungan, serta memberikan motivasi kepada penulis.
3. Bapak dan Ibu dosen Fakultas Ilmu pangan Halal Universitas Djuanda yang telah memberikan bekal berupa ilmu dan juga pengarahan kepada penulis
4. Kakak Febri dan Kakak Awang yang telah membantu dalam menyelesaikan skripsi.
5. Sahabat-sahabat scrumbu tipar Mir'atu S., Ayu S., Loli I., Arnenda S., Nawfal I., Ari T., Yudha S., Ananda N., dan semua teman-teman yang tidak bisa disebutkan satu-persatu yang selalu memberikan dukungan dan membantu penulis saat menyelesaikan skripsi.
6. Ahmad Sidik Rudini yang telah memberikan dukungan dan membantu selama proses penelitian .
7. Teman-teman seperjuangan FIPHAL 2017 yang tidak bisa penulis sebutkan satu persatu terimakasih atas semua dukungan dan motivasinya
8. Teman-teman seperjuangan lintas jurusan yang selalu mesupport satu sama lain untuk menyelesaikan skripsi ini.

Mudah-mudahan setiap tetes peluh yang keluar dari semua pihak dapat menjadi ladang kebaikan untuk mendapat kebaikan dan di ridhoi oleh Allah *Subhanahu wa Ta'ala*. Aamiin

Bogor, 10 Maret 2021

Penulis

DAFTAR ISI

PRAKATA	viii
DAFTAR ISI	x
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
I. PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Tujuan	2
II. TINJAUAN PUSTAKA	3
A. Kulit pisang	3
B. Diabetes Melitus.....	4
C. Enzim α -Glukosidase	5
D. In Silico	6
III. METODE PENELITIAN	8
A. Bahan dan Alat	8
B. Waktu dan Tempat Penelitian	8
C. Metode Penelitian.....	8
D. Analisis.....	10
E. Analisis Data	10
IV. HASIL DAN PEMBAHASAN	11
A. Hasil Identifikasi Struktur Reseptor	11
B. Hasil Identifikasi Struktur Ligan.....	13
C. Hasil Aturan Lipinski	14
D. Analisis dan Visualisasi Hasil Penambatan Molekul	16
V. PENUTUP	25
A. Kesimpulan	25
B. Saran.....	25
DAFTAR PUSTAKA	26
LAMPIRAN	31

DAFTAR TABEL

	<u>Halaman</u>
1. Kandungan Gizi Kulit Pisang.....	3
2. Informasi Makromolekul Protein α -Glukosidase.....	12
3. Hasil Filter Lipinski Ligan Validasi dan Ligan Ekstrak Kulit Pisang.....	15
4. Energi Bebas Gibbs Hasil Penambatan Ligan Ekstrak Kulit Pisang.....	17
5. Hasil RMSD Ligan Ekstrak Kulit Pisang.....	19
6. Interaksi Ligan Validasi dan Ligan Ekstrak Kulit Pisang dengan Reseptor.....	20
7. Hasil Analisis Ekstrak Kulit Pisang Terpilih... ..	24

DAFTAR GAMBAR

	<u>Halaman</u>
1. File Konfigurasi Vina.....	16
2. Proses Menjalankan Perintah pada Command Prompt	16

DAFTAR LAMPIRAN

1. Struktur Protein (Reseptor)	31
2. Struktur Ligan Uji Ekstrak Kulit Pisang	32
3. Hasil Pengaturan <i>grid box</i> reseptor.....	36
4. Preparasi Struktur Reseptor	37
5. Preparasi Struktur Ligan	38
6. Pemisahan Ligan dan Makromolekul.....	39
7. Pengubahan Struktur Ligan 2D menjadi 3D	41
8. Validasi <i>molecular docking</i>	42
9. Visualisasi menggunakan <i>biovia discovery studio visualizer</i>	45
10. Visualisasi 2D Interaksi Ligan dengan Reseptor.....	47
11. Data Hasil <i>Docking Vina</i>	50
12. Jarak Residu Asam Amino Reseptor dengan Ligan.....	54
13. Hasil Pemeriksaan Tingkat <i>Similarity</i> Skripsi.....	55