

ABSTRAK

Nawfal Imanudin. B.1710747. Potential active compounds extract of padang cinnamon (*cinnamomum burmanii*) as an *aldose reductase* inhibitor by molecular docking. Supervised by M. Fakhri Kurniawan and Titi Rohmayanti.

Diabetic neuropathy is also one of the recognized complications associated with increased oxidative stress. Oxidative stress can be increased either due to increased production of free radicals or decreased antioxidant defenses. Causes of oxidative stress can be prevented by inhibiting the enzyme *aldose reductase*. This research was conducted to study the potential of the active compound of Padang cinnamon extract as an *aldose reductase* inhibitor by molecular docking using several analyzes including lipinski's rule, prediction of *aldose reductase* inhibitor activity, Gibbs free bond energy (ΔG), value RMSD (*Root Mean Square Deviation*) value, interaction of amino acid residues. Only *levoglucosan* compounds are not taken orally because they do not meet more than one Lipinski rule. All the active compounds of Padang cinnamon have a PA>PI value, which means they have a low potential for *aldose reductase* inhibitor activity. The selected active compounds included *phenol*, *1,2-benzenediol*, *4-methyl-catechol* and *p-cresol*. Each has a Gibbs free bond energy of -5.9; -6.2; -5.8 and -6.7 kcal/mol and each has RMSD values of 0.020Å, 0.092, 0.042 and 0.052 and ligand extract of cinnamon has the same interaction of amino acid residue as ligand validation through hydrogen bond THR¹¹³, CYS³⁰³ and hydrophobic bonds, namely TYR³⁰⁹ and LEU³⁰⁰.

Keywords: diabetic, padang cinnamon, *aldose reductase*, molecular docking

ABSTRAK

Nawfal Imanudin. B.1710747. Potensi Senyawa Aktif Ekstrak Kayu Manis Padang (*Cinnamomum burmanii*) sebagai Inhibitor Enzim *Aldose Reductase* secara *Molecular Docking*. Dibawah bimbingan M. Fakhri Kurniawan dan Titi Rohmayanti

Neuropati diabetes juga merupakan salah satu komplikasi yang diakui berhubungan dengan meningkatnya stres oksidatif. Stres oksidatif dapat meningkat baik karena peningkatan produksi radikal bebas atau penurunan pertahanan antioksidan. Penyebab stres oksidatif dapat dicegah dengan menghambat enzim *aldose reductase*. Penelitian ini dilakukan untuk mempelajari potensi senyawa aktif ekstrak kayu manis padang sebagai *inhibitor* enzim *aldose reductase* secara *molecular docking* dengan menggunakan beberapa analisis diantaranya aturan Lipinski, prediksi aktivitas *aldose reductase inhibitor*, nilai energi ikatan bebas Gibbs (ΔG), nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*) dan interaksi residu asam amino. Hanya senyawa *levoglucosan* yang tidak dikonsumsi secara oral karena tidak memenuhi lebih dari satu aturan Lipinski. Semua senyawa aktif kayu manis padang memiliki nilai $PA > PI$ artinya memiliki potensi aktivitas *aldose reductase inhibitor* namun rendah. Adapun hasil senyawa aktif yang memiliki potensi penghambatan terbaik diantaranya adalah *phenol*, *1,2-benzenediol*, *4-methyl-catechol* dan *p-cresol*. Masing-masing senyawa tersebut memiliki energi ikatan bebas Gibbs sebesar -5,9; -6,2; -5,8 dan -6,7 kkal/mol dan masing-masing memiliki nilai RMSD sebesar 0,020 Å, 0,092 Å, 0,042 Å dan 0,052 Å serta ligan uji ekstrak kayu manis padang memiliki interaksi residu asam amino yang sama dengan ligan validasi melalui ikatan hidrogen yaitu THR¹¹³, CYS³⁰³ dan ikatan hidrofobik yaitu TYR³⁰⁹ dan LEU³⁰⁰.

Kata Kunci: diabetes, kayu manis padang, *aldose reductase*, *molecular docking*