

INTERAKSI MOLEKULER TANAMAN BERBASIS HERBALDB TERHADAP RESEPTOR ALFA-GLUKOSIDASE (2QMJ) SECARA *IN SILICO*

KEY ZAKIRANA



**DEPARTEMEN BIOKIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Interaksi Molekuler Tanaman Berbasis HerbalDB Terhadap Reseptor Alfa-Glukosidase (2QMJ) Secara *In Silico*” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Februari 2025

Key Zakirana
G84190067



ABSTRAK

KEY ZAKIRANA. Interaksi Molekuler Tanaman Berbasis HerbalDB terhadap Reseptor Alfa-Glukosidase secara *In Silico*. Dibimbing oleh LAKSMI AMBARSARI dan INDA SETYAWATI.

Diabetes melitus terjadi akibat tubuh tidak dapat memproduksi cukup insulin, kondisi ini menyebabkan glukosa tidak dapat masuk dan digunakan oleh sel tubuh sehingga terjadi peningkatan kadar glukosa dalam darah. Senyawa bioaktif pada tanaman herbal asal Indonesia berpotensi sebagai inhibitor enzim alfa-glukosidase, tetapi belum diketahui aktivitasnya pada reseptor alfa-glukosidase sebagai penghambat hiperglikemia. Penelitian ini bertujuan menentukan senyawa bioaktif dari tanaman herbal asal Indonesia terhadap reseptor alfa-glukosidase secara *in silico*. Penambatan molekuler 5964 ligan uji dilakukan melalui AutoDock Vina pada *Google Collab*. Hasil penelitian menunjukkan reseptor alfa-glukosidase tervalidasi dengan kode pdb 2QMJ diunduh dari *Research Collaboratory for Structural Bioinformatics* (RCSB) memiliki nilai RMSD 1.9 Å. Hasil penambatan molekuler 5964 ligan uji diperoleh 26 ligan uji berdasarkan parameter *binding affinity* dan jenis interaksi ligan-reseptor, dari 26 ligan diperoleh 2 ligan terbaik. Senyawa roxburghine B yang berasal dari tanaman *Uncaria gambir* dan senyawa yuehchukene yang berasal dari tanaman *Murraya paniculata* merupakan 2 ligan terbaik yang berpotensi sebagai inhibitor enzim alfa-glukosidase.

Kata kunci: alfa-glukosidase, inhibitor, penambatan molekuler, tanaman herbal

ABSTRACT

KEY ZAKIRANA. Molecular Interaction of Plant-Based Compounds from HerbalDB with Alpha-Glucosidase Receptor. Supervised by LAKSMI AMBARSARI and INDA SETYAWATI.

Diabetes mellitus occurred when the body failed to generated enough insulin. This disease prevented glucose from entering and being utilized by body cells, resulted in a rise in blood glucose levels. Bioactive compounds in Indonesian herbal plants had the potential as alpha-glucosidase inhibitors, however their effect on the alphaglukosidase receptor as a hyperglycemic inhibitor is not yet known. This study aimed to identified bioactive compounds from Indonesian herbal plants against the alpha-glucosidase receptor in silico. Molecular docking of 5964 test ligands were conducted using AutoDock Vina on Google Collab. The study findings indicated that the verified alpha-glucosidase receptor with the pdb code 2QMJ retrieved from the Research Collaboratory for Structural Bioinformatics (RCSB) had an RMSD value of 1.9 Å. The results of molecular docking of 5964 test ligands obtained 26 test ligands based on the binding affinity parameters and the type of ligand-receptor interaction, from 26 ligands obtained 2 best ligands. The roxburghine B compound derived from the *Uncaria gambir* plant and the yuechukene compound derived from the *Murraya paniculata* plant are the 2 best ligands that have the potential to be alpha-glucosidase inhibitors.

Kata kunci: alpha-glucosidase, herbal plants, moleculer docking, inhibitor.



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2025
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.

INTERAKSI MOLEKULER TANAMAN BERBASIS HERBALDB TERHADAP RESEPTOR ALFA-GLUKOSIDASE (2QMJ) SECARA *IN SILICO*

KEY ZAKIRANA

Skripsi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Program Studi Biokimia

**DEPARTEMEN BIOKIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

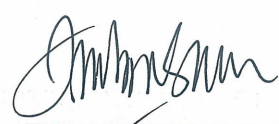
Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

- 1 Prof. Dr. Mega Safithri, S.Si, M.Si
- 2 Dr. Syamsul Falah, S.Hut, M.Si

Judul Skripsi : Interaksi Tanaman Berbasis HerbalDB terhadap Reseptor Alfa-Glukosidase (2QMJ) secara *In Silico*
Nama : Key Zakirana
NIM : G84190067

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Prof. Dr. Dra. Laksmi Ambarsari, MS



Pembimbing 2:
Dr. Inda Setyawati, S.T.P., M.Si.



Diketahui oleh

Ketua Departemen Biokimia:
Prof. Dr. Mega Safithri, S.Si, M.Si
NIP 197709152005012002



Tanggal Ujian:
14 April 2025

Tanggal Lulus:

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah subhanaahu wa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan November 2022 sampai bulan Juli 2023 ini ialah mengenai inhibitor enzim alfa-glukosidase dengan judul “Interaksi Molekuler Tanaman Berbasis HerbalDB Terhadap Reseptor Alfa-Glukosidase (2QMJ) Secara *In Silico*”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada para pembimbing, Prof. Dr. Laksmi Ambarsari, MS. dan Dr. Inda Setyawati, S.T.P., M.Si. yang telah banyak memberikan arahan serta saran dalam menyusun skripsi ini. Ucapan terima kasih juga ingin disampaikan penulis kepada teman-teman satu bimbingan yang selalu memberikan semangat, khususnya Galih Meyandra dan Nadia Aulia Putri yang juga menemani berdiskusi terkait skripsi ini sehingga dapat diselesaikan. Di samping itu, penghargaan penulis sampaikan kepada Ayah, Ibu dan Saudari serta keluarga besar penulis yang telah memberikan dukungan dalam bentuk doa dan kasih sayang. Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Februari 2025

Key Zakirana



IPB University

IPB University
— Bogor Indonesia —

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	x
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	2
1.5 Hipotesis	2
II TINJAUAN PUSTAKA	3
2.1 Enzim Alfa-Glukosidase (2QMJ)	3
2.2 Diabetes Melitus	6
2.3 Penambatan Molekuler	9
2.4 Tanaman Herbal	11
III METODE	20
3.1 Waktu dan Tempat	20
3.2 Alat dan Bahan	20
3.3 Prosedur Kerja	20
IV HASIL	22
4.1 Struktur Reseptor dan Validasi <i>Gridbox</i>	22
4.2 Penambatan Molekuler	24
4.3 Interaksi Ligan-reseptor	26
V PEMBAHASAN	27
5.1 Struktur Reseptor dan Validasi <i>Gridbox</i>	27
5.2 Penambatan Molekuler	28
5.3 Interaksi Ligan-Reseptor	29
VI SIMPULAN DAN SARAN	32
6.1 Simpulan	32
6.2 Saran	32
DAFTAR PUSTAKA	33
LAMPIRAN	39
RIWAYAT HIDUP	51

DAFTAR TABEL

1	Afinitas pengikatan senyawa ligan uji	24
---	---------------------------------------	----

DAFTAR GAMBAR

1	Struktur enzim alfa-glukosidase dengan kode PDB ID 2QMJ (Diagram pita NtMGAM. <i>Domain</i> individual diwarnai sebagai berikut: <i>domain</i> trefoil Tipe-P (cyan), <i>domain</i> N-terminal (kuning), <i>domain</i> katalitik (β/α)8 (merah), <i>domain</i> katalitik Sisipan 1 (ungu), <i>domain</i> katalitik Sisipan 2 (oranye), <i>domain</i> C-terminal proksimal (ProxC) (biru), <i>domain</i> C-terminal distal (DistC) (hijau))	6
2	(a) Jalur pensinyalan dalam sekresi insulin pada sel β pankreas di kondisi fisiologis (b) Penyebab disfungsi	8
3	Tanaman <i>Uncaria gambir</i> dan Struktur senyawa Roxburghine B	12
4	Tanaman <i>Murraya paniculata</i> dan Struktur senyawa Yuechukene	15
5	Tanaman <i>Stemona tuberosa</i> dan Struktur senyawa Stemoenonine	16
6	Buah murbei (kiri) dan struktur senyawa Kuwanon T (kanan)	17
7	Batang kunyit pohon (kiri) dan struktur senyawa (-)-8-oxotetrahydrothalifendine (kanan)	19
8	Buah jeruk pamelio (kiri) dan struktur senyawa honyucitrin (kanan)	19
9	Senyawa ligan uji sebanyak 5964 yang didapatkan dari <i>database</i> herbalDB (a), kemudian disaring menjadi 4412 senyawa yang memiliki bobot molekul kurang dari 500 kDa (b)	22
10.	Validasi penambatan molekuler ligan alami Akarbosa (merah) yang tertambat ligan hasil redocking (biru)	23
11.	Penambatan molekuler akarbosa terhadap reseptor alfa-glukosidase secara 3D (kuning: sugar binding site, hijau: ikatan hidrogen)	23
12.	Penambatan molekuler akarbosa terhadap reseptor alfa glukosidase secara 2D	24
13.	Penambatan molekuler Roxburghine B terhadap reseptor alfa glukosidase secara 2D	26

DAFTAR LAMPIRAN

1	Bagan alir kerja penelitian	47
2	Hasil skor docking validasi penambatan molekuler ligan	48
3	Daftar 26 Ligan uji	49
4	Daftar skor docking ligan alami dan uji	51
5	Visualisasi hasil penambatan molekuler	52
6	Tabel asam amino	60