

STUDI IN SILICO SENYAWA FLAVONOID SEBAGAI INHIBITOR α -GLUKOSIDASE

Ferisha Riani Fauziah

Program Studi Farmasi

ABSTRAK

Indonesia saat ini menempati posisi ke-5 penderita diabetes melitus terbanyak di dunia. Senyawa flavonoid seperti quercetin, luteolin, naringenin, apigenin, dan kaempferol dapat menurunkan kadar glukosa darah. Hingga saat ini, belum ada penelitian yang membandingkan aktivitas, selektivitas, toksisitas kelima senyawa flavonoid tersebut diatas secara *in silico*. Tujuan dari penelitian ini yaitu mengetahui potensi senyawa flavonoid sebagai inhibitor α -Glukosidase secara *in silico*, mengetahui toksisitas dan selektivitas senyawa flavonoid secara *in silico*. Penelitian ini menggunakan metode *in silico* dilakukan simulasi *docking* ligan uji dari senyawa flavonoid yaitu quercetin, luteolin, naringenin, apigenin, dan kaempferol menggunakan aplikasi PLANTS, pengujian toksisitas senyawa flavonoid menggunakan *web server* ProTox-II, pengujian selektivitas dilakukan dengan menghitung rasio skor *docking* antara protein target dan protein non target yang dipilih berdasarkan analisis BLAST. Hasil penelitian berdasarkan simulasi *docking* ligan uji dengan reseptor α -Glukosidase (3TOP), diketahui skor *docking* ligan uji adalah quercetin -80,3645, kaempferol -79,4130, luteolin -77,1522, naringenin -75,3915, dan apigenin -73,2393. Prediksi toksisitas LD50 quercetin yaitu 159 mg/kg, luteolin dan kaempferol sama yaitu 3919 mg/kg, apigenin sebesar 2500 mg/kg, naringenin sebesar 2000 mg/kg. Selektivitas senyawa paling baik adalah kaempferol dengan reseptor target dengan rasio sebesar 1,225, sedangkan acarbose kurang selektif pada reseptor target dengan rasio sebesar 1,065. Lima senyawa flavonoid memiliki potensi sebagai inhibitor α -Glukosidase, namun memiliki aktivitas yang lebih rendah dibandingkan dengan senyawa pembanding acarbose. Dari kelima ligan uji, quercetin memiliki toksisitas tertinggi. Ligan uji kaempferol memiliki selektivitas paling baik diantara ligan-ligan lainnya dengan rasio sebesar 1,225.

Kata Kunci : Flavonoid, α -Glukosidase, *in silico*, acarbose