

Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Turunan Kuersetin Terhadap Aktivitas Peroxisome Proliferator-Activated Receptor-Gamma (PPAR γ) Sebagai Agen Anti Diabetes

Galuh Yogi Pratama
Program Studi Farmasi

ABSTRAK

Latar Belakang: Diabetes melitus tipe II merupakan penyakit metabolik yang dapat disebabkan oleh resistensi insulin jaringan. Resistensi insulin oleh jaringan bisa dikurangi dengan aktivasi *Peroxisome Proliferator-Activated Receptor gamma* (PPAR γ). Senyawa yang telah diketahui sebagai agonis PPAR γ adalah Tiazolidindion. Flavonoid diduga memiliki potensi aktivitas biologis ikatan agonis terhadap PPAR γ .

Tujuan: Mengetahui potensi turunan flavonoid sebagai agonis PPAR γ secara *in silico* serta mengembangkan turunan flavonoid yang memiliki aktivitas agonis terhadap PPAR γ

Metode: Penelitian ini dilakukan dengan jenis penelitian eksperimental komputasi menggunakan penambatan molekul 20 senyawa, persamaan HKSA, dan pengembangan senyawa berdasarkan HKSA.

Hasil : Turunan kuersetin yang memiliki aktivitas paling baik berdasarkan penambatan molekul adalah senyawa 17 dengan nilai $-121,160 \pm 0.669$. Kontrol positif pada PPAR γ adalah rosiglitazon dengan nilai -93.819 ± 0.538 . Persamaan HKSA menggunakan 21 set senyawa berupa 1 senyawa kuersetin dan 20 senyawa turunan kuersetin. Persamaan HKSA yang digunakan memiliki nilai $R = 0,991$; $s = 0,010$; $F = 70,604$; $p < 0,0001$; $Q^2 = 0,917$; $S_{Press} = 0,021$; $S_{DEP} = 0,016$. Pengembangan turunan kuersetin adalah kuersetin 5-dodeca-10-enoat yang memiliki nilai penambatan molekul sebesar $-121,573 \pm 0,274$.

Kata Kunci: *Diabetes, PPAR γ , Flavonoid, penambatan molekul, HKSA*