

**ANALISIS POTENSI ANTIDIABETES DARI SENYAWA AKTIF EKSTRAK
DAUN EKOR NAGA (*Epipremnum pinnatum* (L.) Engl.) SEBAGAI AGONIS
AKTIVATOR PEROXISOME PROLIFERATOR-ACTIVATED
RECEPTOR GAMMA (PPAR- γ) METODE *IN SILICO***



**Diajukan ke Fakultas Kedokteran Universitas Andalas sebagai
Pemenuhan Salah Satu Syarat Untuk Mendapatkan
Gelar Sarjana Ilmu Biomedis**

Pembimbing :

- 1. dr. Rauza Sukma Rita, Ph.D**
- 2. Dra. Elmatris Sy, MS**

Oleh :

**RAISA MADANI
NIM. 2110342002**

**PRODI ILMU BIOMEDIS PROGRAM SARJANA
FAKULTAS KEDOKTERAN
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG 2025**

ABSTRACT

ANALYSIS OF THE ANTIDIABETIC POTENTIAL OF ACTIVE COMPOUNDS FROM DRAGON TAIL LEAF EXTRACT (*Epipremnum pinnatum* (L.) ENGL.) AS PEROXISOME PROLIFERATOR-ACTIVATED RECEPTOR GAMMA (PPAR- γ) AGONIST ACTIVATORS USING AN IN SILICO METHOD

By

Raisa Madani, Rauza Sukma Rita, Elmatris Sy, Dessy Arisanty, Rita Maliza, Mohamad Reza

Diabetes mellitus (DM) is a metabolic disorder in which treatment strategies often involve the activation of PPAR- γ . Compounds with both anti-inflammatory and antidiabetic activities have the potential to exert synergistic effects by enhancing insulin sensitivity and preserving pancreatic β -cell function. Dragon's tail leaf has been reported to possess such properties; however, its relationship with PPAR- γ , a key regulator of glucose and lipid metabolism, has not yet been investigated. Therefore, this study aimed to explore the antidiabetic potential of active compounds from dragon's tail leaf as PPAR- γ agonist activators using an in silico approach.

This study was conducted from June to September 2025. Compound identification was conducted using LC-HRMS and PubChem. Antidiabetic activity was predicted using PASSOnline, while Drug-likeness was evaluated based on Lipinski's Rule of Five. Pharmacokinetic properties were assessed using SwissADME, and toxicity was predicted with ProTox-3.0. Candidate compounds that met these criteria were further analyzed through molecular docking on PPAR- γ protein (PDB ID: 7AWC) using the Molecular Operating Environment (MOE) to determine binding affinity and amino acid residue interactions.

The results showed that among 166 identified compounds, 51 fulfilled the criteria for antidiabetic activity, drug-likeness, and non-toxicity. Docking analysis showed that 13 compounds had stronger (more negative) binding affinities than the native ligand (-8.42 kcal/mol). Palmitoyl ethanolamide (-8.77 kcal/mol), Oleoyl ethanolamide (-9.48 kcal/mol), Docosanamide (-9.26 kcal/mol), and Erucamide (-8.96 kcal/mol) shared key hydrogen and hydrophobic interaction residues with both the native ligand and rosiglitazone, thereby highlighting their potential as PPAR- γ agonist activator candidates for DM therapy.

Keywords : Diabetes mellitus, PPAR- γ , *Epipremnum pinnatum*, LC-HRMS, molecular docking.

ABSTRAK

ANALISIS POTENSI ANTIDIABETES DARI SENYAWA AKTIF EKSTRAK DAUN EKOR NAGA (*Epipremnum pinnatum* (L.) Engl.) SEBAGAI AGONIS AKTIVATOR PEROXISOME PROLIFERATOR-ACTIVATED RECEPTOR GAMMA (PPAR- γ) METODE *IN SILICO*

Oleh

Raisa Madani, Rauza Sukma Rita, Elmatris Sy, Dessy Arisanty, Rita Maliza,
Mohamad Reza

Diabetes melitus (DM) merupakan penyakit metabolik yang pengobatannya melibatkan aktivasi PPAR- γ . Senyawa aktif dengan aktivitas antiinflamasi dan antidiabetes berpotensi memberikan efek sinergis dalam meningkatkan sensitivitas insulin dan menjaga fungsi sel β pankreas. Daun ekor naga telah dilaporkan memiliki sifat antiinflamasi dan antidiabetes, namun hingga saat ini belum ada penelitian yang mengeksplorasi hubungan daun ekor naga dengan PPAR- γ , target utama dalam regulasi glukosa dan metabolisme lipid. Penelitian ini bertujuan mengeksplorasi potensi antidiabetes senyawa aktif daun ekor naga sebagai agonis aktivator PPAR- γ metode *in silico*.

Penelitian dilakukan dari bulan Juni sampai September 2025. Identifikasi senyawa menggunakan *Liquid Chromatography-High Resolution Mass Spectrometry* (LC-HRMS). Prediksi aktivitas antidiabetes dilakukan melalui PASSOnline, uji *drug-likeness* menggunakan *Lipinski's Rule of Five*. Farmakokinetik dianalisis menggunakan SwissADME, dan prediksi toksisitas dilakukan dengan ProTox-3.0. Kandidat senyawa yang memenuhi kriteria dianalisis lebih lanjut melalui *molecular docking* terhadap protein target PPAR- γ (PDB ID: 7AWC) menggunakan perangkat lunak *Molecular Operating Environment* (MOE) untuk menilai afinitas ikatan dan kesamaan residu asam amino.

Dari 166 senyawa yang teridentifikasi, sebanyak 51 senyawa memenuhi kriteria aktivitas antidiabetes, *drug-likeness*, dan tidak toksik. Hasil *docking* menunjukkan 11 senyawa memiliki nilai afinitas ikatan lebih kuat (lebih negatif) dibanding *native ligand* (-8.42 kcal/mol). Senyawa *Palmitoyl ethanolamide* (-8.77 kcal/mol), *Oleoyl ethanolamide* (-9.48 kcal/mol), *Docosanamide* (-9.26 kcal/mol), dan *Erucamide* (-8.96 kcal/mol), memiliki kesamaan residu asam amino dengan *native ligand* dan perbandingan sehingga berpotensi sebagai kandidat agonis aktivator PPAR- γ dalam terapi DM.

Kata Kunci : Diabetes melitus, PPAR- γ , *Epipremnum pinnatum*, LC-HRMS, *molecular docking*.