

**ANALISIS POTENSI ANTIDIABETES DARI SENYAWA AKTIF EKSTRAK
DAUN EKOR NAGA (*Epipremnum pinnatum* (L.) Engl.)
SEBAGAI INHIBITOR ALFA GLUKOSIDASE
DENGAN METODE *IN SILICO***



Skripsi

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

Pembimbing :

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

Oleh :

**MUTHIA RASYIDA
NIM. 2110343001**

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

ABSTRACT

ANALYSIS OF THE ANTIDIABETIC POTENTIAL OF ACTIVE COMPOUNDS FROM DRAGON TAIL LEAF (*Epipremnum pinnatum* (L.) Engl.) EXTRACT AS ALPHA-GLUCOSIDASE INHIBITORS USING IN SILICO

By

**Muthia Rasyida, Elmatris Sy, Rauza Sukma Rita, Dessy Arisanty, Biomechy
Oktomalio Putri, Mohamad Reza**

*Type 2 diabetes mellitus is a chronic metabolic disease with high prevalence and serious complication risks, prompting ongoing development of new therapies. This study aims to analyze in silico the antidiabetic potential of active compounds from dragon's tail leaf extract (*Epipremnum pinnatum* (L.) Engl.) as an effective alpha-glucosidase inhibitor in lowering postprandial blood glucose levels.*

The research was conducted from June to September 2025. Compounds from the ethanol extract of dragon tail leaves were identified using LC-HRMS. The identified compounds were subsequently screened based on pharmacokinetic and pharmacodynamic parameters using an in silico approach. The selected compounds were analyzed using molecular docking against the alpha-glucosidase enzyme with acarbose as the reference ligand. The main parameters observed were binding affinity values and interactions with amino acid residues at the enzyme's active site.

Docking results revealed that four compounds show lower binding affinity values than acarbose and interacted with similar enzyme active site residues. The four compounds are 9S,13R-12-Oxophytodienoic acid, 3-[(3-hydroxypentadecanoyl)oxy]-4-(trimethylammonio)butanoate, oleoyl ethanolamide, and erucamide. The binding affinity values range from -7.5022 to -8.0958 kcal/mol. These findings indicate that this active compound has potential as a candidate alpha-glucosidase inhibitor in the development of diabetes mellitus therapies. However, further validation through in vitro and in vivo testing is needed to confirm its biological activity, pharmacokinetics, and safety profile in representative biological systems.

Keywords: *Type 2 Diabetes Mellitus, Alpha Glucosidase, *Epipremnum pinnatum*, LC-HRMS, Molecular Docking*

ABSTRAK

ANALISIS POTENSI ANTIDIABETES DARI SENYAWA AKTIF EKSTRAK DAUN EKOR NAGA (*Epipremnum pinnatum* (L.) Engl.) SEBAGAI INHIBITOR ALFA GLUKOSIDASE DENGAN METODE *IN SILICO*

Oleh

Muthia Rasyida, Elmatris Sy, Rauza Sukma Rita, Dessy Arisanty, Biomechy
Oktomalia Putri, Mohamad Reza

Diabetes melitus tipe 2 merupakan penyakit metabolik kronis dengan prevalensi tinggi dan risiko komplikasi serius sehingga pengembangan terapi baru terus dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis secara *in silico* potensi antidiabetes dari senyawa aktif ekstrak daun ekor naga (*Epipremnum pinnatum* (L.) Engl.) sebagai inhibitor alfa glukosidase yang efektif dalam menurunkan kadar glukosa darah postprandial.

Penelitian dilakukan sejak bulan Juni hingga September 2025. Identifikasi senyawa dari ekstrak etanol daun ekor naga dilakukan menggunakan LC-HRMS. Senyawa-senyawa yang teridentifikasi selanjutnya diseleksi berdasarkan parameter farmakokinetik dan farmakodinamik menggunakan pendekatan *in silico*. Senyawa terpilih kemudian dianalisis menggunakan metode *molecular docking* terhadap enzim alfa glukosidase dengan acarbose sebagai ligan pembanding. Parameter utama yang diamati, yaitu nilai *binding affinity* dan interaksi dengan residu asam amino di situs aktif enzim.

Hasil *docking* menunjukkan bahwa empat senyawa memiliki nilai *binding affinity* lebih negatif daripada acarbose dan berinteraksi dengan residu situs aktif enzim yang serupa. Keempat senyawa tersebut adalah 9S,13R-12-Oxophytodienoic acid, 3-[(3-hydroxypentadecanoyl)oxy]-4-(trimethylammonio)butanoate, oleoyl ethanolamide, dan erucamide. Nilai *binding affinity* berkisar antara -7.5022 hingga -8.0958 kkal/mol. Temuan ini menunjukkan bahwa senyawa aktif tersebut berpotensi sebagai kandidat inhibitor alfa glukosidase dalam upaya pengembangan terapi diabetes melitus. Namun, diperlukan validasi lebih lanjut melalui uji *in vitro* dan *in vivo* untuk mengkonfirmasi aktivitas biologis, farmakokinetik, serta profil keamanan dalam sistem biologis yang representatif.

Kata kunci: Diabetes Melitus Tipe 2, Alfa Glukosidase, *Epipremnum pinnatum*, LC-HRMS, *Molecular Docking*