

**PENENTUAN KEMAMPUAN INHIBITOR ENZIM α -AMILASE DAN
 α -GLUKOSIDASE SENYAWA-SENYAWA DARI *Spirulina platensis*
SEBAGAI ANTIDIABETES DENGAN SIMULASI *DOCKING***

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

ADETYA PUTRI

BP: 1710412021



Pembimbing I : Dr. rer. nat. Syafrizayanti

Pembimbing II : Marniati Salim, M.S

**PROGRAM STUDI SARJANA
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2022**

**PENENTUAN KEMAMPUAN INHIBITOR ENZIM α -AMILASE DAN
 α -GLUKOSIDASE SENYAWA-SENYAWA DARI *Spirulina platensis*
SEBAGAI ANTIDIABETES DENGAN SIMULASI DOCKING**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh

ADETYA PUTRI

BP: 1710412021



Skripsi diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Andalas

**PROGRAM STUDI SARJANA
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2022**

INTISARI

PENENTUAN KEMAMPUAN INHIBITOR ENZIM α -AMILASE DAN α -GLUKOSIDASE SENYAWA-SENYAWA DARI *Spirulina platensis* SEBAGAI ANTIDIABETES DENGAN SIMULASI DOCKING

Oleh:

Adetya Putri (BP: 1710412021)

Pembimbing:

Dr. rer. nat. Syafrizayanti dan Marniati Salim, M.S

Diabetes Melitus (DM) Tipe 2 merupakan penyakit dengan gejala hiperglikemia, banyak menyerang orang dewasa dan dengan jumlah kasus yang meningkat setiap harinya pada populasi dunia. Enzim yang berperan terkait DM Tipe 2 yaitu α -amilase dan α -glukosidase, bertindak dalam menghidrolisis pati pada pankreas. Target terapi dalam pengobatan DM Tipe 2 yaitu penurunan reabsorpsi glukosa di usus dengan melakukan penghambatan enzim α -amilase dan α -glukosidase. Dalam beberapa studi, beragam senyawa bioaktif yang terkandung pada ekstrak *Spirulina platensis* memiliki aktivitas antioksidan dan agen antidiabetes sebagai sumber obat-obatan potensial yang tidak menunjukkan efek samping. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan memprediksi potensi senyawa metabolit sekunder dari ekstrak *S. platensis* sebagai inhibitor α -amilase dan α -glukosidase dalam pengembangan desain obat dari bahan alam dengan melihat interaksi yang terjadi antara protein target dengan ligan melalui simulasi *docking*. Interaksi yang terbentuk serta stabilitas konformasi menjadi perhatian dalam pengamatan ini. Hasil dari pengujian dengan 34 senyawa menunjukkan bahwa dua senyawa uji berpotensi baik sebagai inhibitor enzim α -amilase, dan tiga senyawa uji memiliki aksi paling baik dalam penghambatan α -glukosidase. Aksi penghambatan senyawa uji terhadap α -glukosidase lebih baik dibandingkan dengan penghambatan terhadap α -amilase dengan total afinitas sebesar -188,37 kcal/mol dan -174,07 kcal/mol berturut-turut. Senyawa-senyawa ini mampu menghambat kerja kedua enzim baik secara sinergis maupun individual. Hasil dari aksi penghambatan oleh senyawa uji dibandingkan dengan akarbosa sebagai senyawa pembanding. Untuk memvalidasi hasil simulasi *docking* diperlukan melakukan penelitian lebih lanjut secara eksperimental pada laboratorium.

Kata kunci: DM, α -amilase, α -glukosidase, *Spirulina platensis*, simulasi *docking*.

ABSTRACT

DETERMINATION OF α -AMYLASE AND α -GLUCOSIDASE ENZYME INHIBITORS ABILITY FROM *Spirulina platensis* AS ANTIDIABETIC WITH DOCKING SIMULATION

By:

Adetya Putri (1710412021)

Supervisor:

Dr. rer. nat. Syafrizayanti and Marniati Salim, M.S

Diabetes Mellitus (DM) Type 2 is a hyperglycemic disease symptom that affects adult with increasing cases every day of the world's population. Enzymes involved in DM Type 2, i.e. α -amylase and α -glucosidase, act to hydrolyze starch in the pancreas. The target of therapy in the DM Type 2 treatment is to decrease glucose reabsorption in the intestine by inhibiting α -amylase and α -glucosidase enzymes. In several studies, various bioactive compounds contained in *Spirulina platensis* extract have antioxidant activity and antidiabetic agents as potential sources of drugs. Therefore, this study aims to predict the potential of secondary metabolite compounds from *S. platensis* extracts as α -amylase and α -glucosidase inhibitors in the development of drug designs from natural ingredient by observing the interaction between targets protein and it's ligand through docking simulations. The formed interactions as well as the conformation are considered in this observation. The results of the 34 tested compounds showed that two compounds were likely to be inhibitors of the α -amylase enzyme, and three compounds had the best action in inhibiting α -glucosidase. The inhibitory action of the tested compounds against the α -glucosidase was better than the α -amylase inhibition with a total affinity of -188,37 kcal/mol and -174.07 kcal/mol, respectively. These compounds are synergistically and individually able to inhibit the work of both enzymes. The inhibition results of the tested compounds were compared with acarbose as a comparison compound. To validate the docking simulation results, it is necessary to conduct further research experimentally in the laboratory.

Keywords: DM, α -amylase, α -glucosidase, *Spirulina platensis*, docking simulation.