

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
BUAH MENGKUDU (*Morinda citrifolia* L.) SEBAGAI
INHIBITOR ALFA GLUKOSIDASE ANTIDIABETES**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar Sarjana
Farmasi**



**RIZKI AHMAD ROJAK
31120218**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2024**

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM BUAH MENGKUDU (*Morinda citrifolia L.*) SEBAGAI INHIBITOR ALFA GLUKOSIDASE ANTIDIABETES

Rizki Ahmad Rojak

Program Studi S-1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Diabetes melitus merupakan kondisi kronis yang disebabkan oleh ketidakmampuan tubuh untuk menghasilkan insulin secara normal atau kurangnya insulin akibat kerusakan jaringan akibat gaya hidup tidak sehat. Salah satu reseptor penting dalam metabolisme karbohidrat adalah α -Glukosidase, yang bekerja dengan menghambat pemecahan karbohidrat di usus. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa dalam buah mengkudu (*Morinda citrifolia L.*) sebagai kandidat obat baru antidiabetes melalui penambatan molekul pada reseptor α -Glukosidase. Metode docking molekuler digunakan untuk menganalisis interaksi antara 58 senyawa mengkudu dan reseptor α -Glukosidase (PDB: 3A4A), dengan miglitol sebagai pembanding. Hasil menunjukkan senyawa 6-O-b-D-Glucopyranosyl-D-glucose memiliki ikatan energi bebas lebih rendah dibandingkan dengan pembanding dan ligan asli. Senyawa Morindone dan Lucidin juga menunjukkan ikatan energi bebas lebih rendah daripada pembanding. Simulasi molekular dinamik mengkonfirmasi stabilitas ketiga senyawa tersebut selama 100 ns. Temuan ini menunjukkan potensi senyawa dalam buah mengkudu sebagai penghambat α -Glukosidase yang menjanjikan untuk pengembangan lebih lanjut dalam pengobatan diabetes melitus tipe II.

Kata kunci: Buah mengkudu, Inhibitor α -Glukosidase, Studi *in silico*

Abstract

*Diabetes mellitus is a chronic condition caused by the body's inability to produce insulin normally or a lack of insulin due to tissue damage from an unhealthy lifestyle. One important receptor in carbohydrate metabolism is α -Glucosidase, which works by inhibiting the breakdown of carbohydrates in the gut. This study aims to evaluate the potential of compounds in noni fruit (*Morinda citrifolia L.*) as new antidiabetic drug candidates through molecular docking on α -Glucosidase receptor. Molecular docking method was used to analyze the interaction between 58 noni compounds and α -Glucosidase receptor (PDB: 3A4A), with miglitol as a comparator. Results showed the compound 6-O-b-D-Glucopyranosyl-D-glucose had a lower free energy bond compared to the comparator and native ligand. Morindone and Lucidin compounds also showed lower free energy bonds than the comparator. Dynamic molecular simulations confirmed the stability of the three compounds for 100 ns. These findings indicate the potential of compounds in noni fruit as promising α -Glucosidase inhibitors for further development in the treatment of type II diabetes mellitus.*

Keywords: Noni fruit, α -Glucosidase inhibitor; *In silico* study.