

**PENAMBATAN SENYAWA YANG TERDAPAT DALAM BIJI
KEMRUNGGI (*Caesalpinia crista L.*) SEBAGAI ANTI
DIABETES**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat guna memperoleh gelar Sarjana pada
Program Studi S-1 Farmasi
STIKes Bakti Tunas Husada

**DEMY APRILIANA ROSWANDIE
NIM 31115126**



**STIKes BAKTI TUNAS HUSADA TASIKMALAYA
PROGRAM STUDI S1 FARMASI
TASIKMALAYA
2020**

ABSTRAK

Cassane diterpenoid dan *norcassane diterpenoid* merupakan senyawa yang terdapat dalam biji Kemrunggi (*Caesalpinia crista L.*) yang dapat dimanfaatkan sebagai obat antidiabetes. Beberapa penelitian menunjukkan hasil bahwa senyawa yang ada pada biji kemrunggi memiliki aktivitas antidiabetes (Pratiwi dkk, 2018). Diabetes mellitus merupakan penyakit yang ditandai dengan peningkatan kadar glukosa dalam darah (hiperglikemia). Penelitian ini dilakukan untuk memprediksi senyawa aktif antidiabetes dari biji kemrunggi (*Caesalpinia crista L.*), dilakukan perbandingan dengan senyawa obat yang berada di pasaran dengan tujuan untuk memprediksi kandidat senyawa obat baru yang berpotensi sebagai antidiabetes. Preparasi reseptor 5Y2O dilakukan untuk memisahkan antara protein dengan *native ligand*. 68 senyawa uji dilakukan preparasi ligan dan penerapan uji *drug scan* menurut aturan *lipinski's rule of five* dengan menggunakan *software MarvinSketch*, prediksi ADME dan uji toksisitas menggunakan uji *PreADMET*, pada proses docking menggunakan *AutodockTools* dan visualisasi hasil menggunakan *Discovery Studio View*. Hasil analisis *docking* dilakukan dengan melihat nilai *binding affinity* sehingga diperoleh hasil yang menunjukkan bahwa semua senyawa memiliki *energi binding affinity* lebih rendah dari senyawa pembanding. *Caesalpinin MJ* memiliki energi ikatan paling stabil karena menunjukkan nilai *binding affinity* yang paling rendah, yaitu sebesar -9,18 kkal. *Caesalpinin MJ* diprediksi memiliki efek yang lebih baik dibandingkan dengan metformin sehingga dapat dijadikan sebagai kandidat senyawa obat baru untuk pengobatan diabetes.

Kata kunci: Kemrunggi (*Caesalpinia crista L.*), *Docking*, Diabetes Mellitus, *Binding Affinity*

ABSTRACT

Cassane diterpenoid and *norcassane diterpenoid* are compounds found in seeds of Kemrunggi (*Caesalpinia crista L.*) that can be used as antidiabetic drugs. Several studies have shown that compounds in kemrunggi seeds have antidiabetic activity (Pratiwi et al, 2018). Diabetes mellitus is a disease characterized by increased levels of glucose in the blood (*hyperglycemia*). This research was conducted to predict antidiabetic active compounds from kemrunggi seeds (*Caesalpinia crista L.*), to compare with medicinal compounds on the market with the aim of predicting potential candidates for new drug compounds as antidiabetic. A 5Y2O receptor preparation is performed to separate the protein from the native ligand. 68 test compounds were carried out for ligand preparation and drug scan test according to lipinski's rule of five using MarvinSketch software, ADME prediction and toxicity testing using PreADMET test, in the docking process using AutodockTools and visualization of results using Discovery Studio View. The results of the docking analysis are done by looking at the binding value of affinity so that the results obtained indicate that all compounds have a lower binding energy affinity than the comparison compound. *Caesalpinin MJ* has the most stable bond energy because it shows the lowest binding affinity value, which is -9.18 kcal. *Caesalpinin MJ* is predicted to have a better effect compared to metformin so that it can be used as a candidate for new drug compounds for the treatment of diabetes.

Key Word : Kemrunggi (*Caesalpinia crista L.*), *Docking*, Diabetes Mellitus, *Binding Affinity*