

Pencarian inhibitor α -glukosidase buah ketapang (*Terminalia catappa* L.) menggunakan penambatan molekuler dan uji *in vitro* fraksi etil asetat = Screening of α -glucosidase inhibitor ketapang fruit (*Terminalia catappa* L.) use molecular docking and *in vitro* test of ethyl acetate fraction

Bina Lohita Sari, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20365470&lokasi=lokal>

Abstrak

Inhibitor α -glukosidase merupakan obat terapeutik untuk penyakit diabetes yang bekerja menghambat metabolisme karbohidrat. Buah ketapang (*Terminalia catappa* L.) mempunyai efek menghambat α -glukosidase, sehingga dapat menjadi obat alami yang potensial untuk pengobatan tipe II diabetes melitus. Kandungan kimia buah ketapang adalah fenol, antosianin, dan fitosterol.

Penelitian ini bertujuan untuk mencari senyawa aktif menggunakan metode penambatan molekuler dengan perangkat lunak AutoDock4.2. Sebagai protein target adalah enzim α -glukosidase dari *Saccharomyces cerevisiae*. Senyawa aktif yang dihasilkan berdasarkan nilai energi bebas terbaik (G) dan konstanta inhibisi (K_i). Pencarian senyawa aktif dilakukan melalui ekstraksi dan fraksinasi buah ketapang, kemudian penentuan senyawa kimia dengan GC-MS dan uji aktivitas penghambatan α -glukosidase dengan uji *in vitro*. Nilai energi bebas terbaik, $G = -10,61$ kkal/mol dan konstanta inhibisi $0,02 \mu\text{M}$ untuk stigmast-5-en-3-ol(-sitosterol). Maserasi bertingkat buah ketapang dengan pelarut heksan, etil asetat dan metanol dilanjutkan dengan kromatografi kolom, menghasilkan fraksi B etil asetat dengan aktivitas *in vitro* $\text{IC}_{50} = 296,28$ ppm yang kemudian diidentifikasi dengan GC-MS memberikan hasil adanya stigmast-5-en-3-ol asetat dan stigmast-4-en-3-on dan tidak ditemukan adanya α -sitosterol. Diduga dalam fraksi tersebut senyawa yang memberikan aktivitas inhibisi α -glukosidase adalah turunan α -sitosterol yaitu stigmast-5-en-3-ol asetat dan stigmast-4-en-3-on dengan energi bebas $-11,14$ dan $-9,79$ kkal/mol.

<hr>

α -Glucosidase inhibitors are therapeutic drugs for diabetes that act through the inhibition of carbohydrate metabolism. Indian Almond fruits (*Terminalia catappa* L.) have inhibitory effect on α -glucosidase, therefore can be a potential natural source for the treatment of type II diabetes mellitus. Chemical constituents of ketapang fruits are phenol, antocyanin, and phytosterol.

This research aim to find the active compound with molecular docking method use AutoDock4.2 software. The target protein is α -glucosidase enzyme from *Saccharomyces cerevisiae*. Active compound produced by the best binding energy value (G) and inhibition constants (K_i). Screening of active compound conducted by extraction and fractionation of ketapang fruits, then determination the chemical compound use GC-MS, and evaluate the inhibitory activity of α -glucosidase with *in vitro* test. The best value of binding energy, $G = -10.61$ kcal/mol and inhibition constant $0.02 \mu\text{M}$ is for stigmast-5-en-3-ol (α -sitosterol). Stepwise maceration of ketapang fruit with hexane, ethyl acetate and methanol followed by column chromatography, yield ethyl acetate B fraction with *in vitro* activity $\text{IC}_{50} = 296.28$ ppm then identified by GC-MS give result stigmast-5-en-3-ol acetate and stigmast-4-en-3-one and did not find any α -sitosterol. Suspectly in the

fraction of compounds that provide α -glucosidase inhibitory activity is derived from β -sitosterol, that is stigmast-5-en-3-ol acetate and stigmast-4-en-3-one with binding energy -11.14 and -9.79 kcal / mol.