

**MOLECULAR DOCKING SENYAWA BIOAKTIF EKSTRAK
Paraboea leuserensis TERHADAP PROTEIN TARGET
DIABETES MELLITUS**

ABSTRAK

Jelita Tri Dewi Masta Ziliwu

223307030092

Pendahuluan: Diabetes melitus merupakan penyakit metabolik kronis yang ditandai dengan peningkatan kadar glukosa darah. Salah satu pendekatan terapi diabetes melitus tipe 2 adalah penghambatan enzim α -glukosidase yang berperan dalam hidrolisis karbohidrat di usus halus. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi senyawa bioaktif dari ekstrak *Paraboea leuserensis* (*Paraboea leuserensis*) sebagai inhibitor α -glukosidase. **Metode:** Penelitian ini menggunakan teknik *molecular docking*. Protein target yang digunakan adalah ntMGAM (PDB ID: 3L4Y) dengan senyawa uji *deoxyspergualin*, *quercetin*, dan *ethyl iso-allocholate*. Simulasi *docking* dilakukan menggunakan AutoDock Vina, dan analisis interaksi menggunakan BIOVIA Discovery Studio. Validasi metode *docking* melalui *redocking native ligand* menghasilkan nilai RMSD sebesar 0,618 Å, yang menunjukkan metode valid. **Hasil:** Penelitian *molecular docking* ini menunjukkan bahwa *deoxyspergualin* memiliki energi ikatan terendah (-9,4 kcal/mol) serta pola interaksi residu yang serupa dengan *native ligand*. **Kesimpulan:** Berdasarkan hasil tersebut, *deoxyspergualin* berpotensi sebagai kandidat inhibitor α -glukosidase dan agen antidiabetes.

Kata kunci: Diabetes melitus, α -glukosidase, *Molecular docking*, *Paraboea leuserensis*

**MOLECULAR DOCKING OF BIOACTIVE COUMPONDS OF
Paraboea leuserensis EXTRACT AGAINST DIABETES MELLITUS
TARGET PROTEINS**

ABSTRACT

Jelita Tri Dewi Masta Ziliwu

223307030092

Introduction: Diabetes mellitus is a chronic metabolic disease characterized by elevated blood glucose levels. One therapeutic approach for type 2 diabetes mellitus is inhibition of the α -glucosidase enzyme, which plays a role in carbohydrate hydrolysis in the small intestine. This study aims to analyze the potential of bioactive compounds from *Paraboea leuserensis* (*Paraboea leuserensis*) extract as α -glucosidase inhibitors. **Methods:** This study used molecular docking techniques. The target protein used was ntMGAM (PDB ID: 3L4Y) with test compounds deoxyspergualin, quercetin, and ethyl iso-allocholate. Docking simulations were performed using AutoDock Vina, and interaction analysis using BIOVIA Discovery Studio. Validation of the docking method through redocking native ligand produced a RMSD value of 0.618 Å, indicating a valid method. **Results:** This molecular docking study showed that deoxyspergualin has the lowest binding energy (−9.4 kcal/mol) and a residue interaction pattern similar to the native ligand. **Conclusion:** Based on these results, deoxyspergualin has the potential as a candidate for α -glucosidase inhibitor and antidiabetic agent.

Keywords: Diabetes mellitus, α -glukosidase, molecular docking, *Paraboea leuserensis*