

**STUDI *IN SILICO* POTENSI ANTIDIABETES SENYAWA ASAM
ORGANIK VINEGAR NIRA AREN (*Arenga pinnata* Merr.)
TERHADAP ENZIM α -AMILASE DAN α -GLUKOSIDASE**

ABSTRAK

Latar Belakang : Diabetes adalah salah satu kesehatan global yang berkembang paling cepat, diperkirakan 589 juta orang hidup dengan diabetes pada tahun 2024, jumlah total penderita diabetes diperkirakan akan mencapai 853 juta pada tahun 2050. Di Provinsi Sulawesi Selatan kasus diabetes berkisar antara 1,0% sampai 6,1%. Cara yang efektif untuk mengatasi hiperglikemia pada diabetes adalah dengan menghambat enzim α -amilase dan α -glukosidase yang berperan dalam pemecahan pati menjadi glukosa. Nira aren dipercaya mampu menurunkan kadar glukosa darah.

Tujuan Penelitian : Untuk memprediksi potensi antidiabetes senyawa asam organik vinegar nira aren (*Arenga pinnata* Merr.) dengan menghambat enzim α -amilase dan α -glukosidase melalui pendekatan *molecular docking*, *molecular dynamics* dan prediksi ADMET.

Metode Penelitian : Penelitian ini menggunakan metode pendekatan *in silico* dengan langkah awal yaitu studi literatur terhadap senyawa vinegar nira aren (*Arenga pinnata* Merr.) kemudian dilakukan simulasi *molecular docking* menggunakan aplikasi PyMOL, PyRx dan BIOVA Discovery Studio, *docking* dilakukan dengan mengambil senyawa uji asam organik vinegar nira aren (*Arenga pinnata* Merr.) hasil HPLC (*Performance Liquid Chromatography*) setelah semua senyawa di *docking*, senyawa dengan nilai *binding affinity* terbaik dilanjutkan ke tahap selanjutnya yaitu simulasi *molecular dynamics* untuk melihat kestabilan kompleks reseptor-ligan menggunakan aplikasi GROMACS. Dan tahap akhir yaitu prediksi ADMET (*Absorbpsi*, *Distribusi*, *Metabolisme*, *Ekskresi* dan *Toksisitas*) menggunakan situs web SwissADME dan pkCSM.

Hasil : Hasil penelitian menunjukkan senyawa asam organik vinegar nira aren (*Arenga pinnata* Merr.) mampu berikatan dengan reseptor 1B2Y dan 5NN8 dengan nilai *binding affinity* terbaik -5,1 untuk 5NN8 dan -4,8 untuk 1B2Y yang diperoleh dari senyawa uji asam tartarat. Kompleks reseptor 5NN8 dan ligan asam tartarat juga masih stabil selama simulasi *molecular dynamics*. Semua senyawa uji memenuhi aturan lipinski tanpa adanya pelanggaran dan semua senyawa bersifat non toksic.

Kata Kunci : Antidiabetes, vinegar nira aren (*Arenga pinnata* Merr.) , *in silico*, α -amilase, α -glukosidase