

ABSTRAK

MOLECULAR DOCKING SENYAWA TURUNAN FLAVONOID DENGAN PROTEIN 3KC0 DAN UJI AKTIVITAS ANTIDIABETES EKSTRAK DAUN KELOR PADA MENCIT JANTAN (*Mus musculus*)

Oleh

Maysya Dhiya Rizky Allisandra

Daun kelor dapat dimanfaatkan sebagai antidiabetes karena adanya kandungan senyawa flavonoid. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui jenis senyawa turunan flavonoid daun kelor sebagai antidiabetes berdasarkan *molecular docking* dan mengetahui aktivitas antidiabetes ekstrak daun kelor pada mencit jantan. Pada penelitian ini dilakukan ekstraksi daun kelor, karakterisasi senyawa flavonoid dengan spektrofotometer UV-Vis, spektrofotometer FTIR dan LC-MS, *molecular docking* senyawa turunan flavonoid daun kelor dengan protein 3KC0, serta uji aktivitas antidiabetes ekstrak daun kelor terhadap mencit jantan. Hasil karakterisasi menunjukkan ekstrak daun kelor mengandung senyawa turunan flavonoid yaitu myricetin, hesperidin dan kuersetin. Berdasarkan *molecular docking*, senyawa yang berpotensi sebagai antidiabetes adalah senyawa hesperidin dengan energi ikatan sebesar -10,03 kkal/mol dan residu asam amino pada sisi aktif protein 3KC0 yaitu LEU30, THR27, LYS112 dan GLY28. Senyawa terbaik berdasarkan farmakokinetik adalah senyawa kuersetin, sedangkan senyawa terbaik berdasarkan hasil toksisitas adalah senyawa hesperidin. Uji aktivitas antidiabetes menunjukkan dosis optimal ekstrak daun kelor dalam menurunkan kadar glukosa darah mencit jantan yaitu 200 mg/kg BB dan persentase penurunan glukosa (%GL) sebesar 69,56% dengan nilai signifikan uji ANOVA $p(\leq 0,05)$. Oleh karena itu, daun kelor dapat digunakan sebagai antidiabetes.

Kata kunci: antidiabetes, daun kelor, flavonoid, *molecular docking*, mencit.

ABSTRACT

MOLECULAR DOCKING OF FLAVONOID-DERIVED COMPOUNDS WITH 3KC0 PROTEIN AND ANTIDIABETIC ACTIVITY TEST OF MORINGA LEAVES EXTRACT IN MALE MICE (*Mus musculus*)

By

Maysya Dhiya Rizky Allisandra

Moringa leaves can be used as an antidiabetic because of the content of flavonoid compounds. This study aims to determine the types of flavonoid derivative compounds of Moringa leaves as antidiabetics based on molecular docking and determine the antidiabetic activity of Moringa leaves extract in male mice. In this study, Moringa leaves extraction, characterization of flavonoid compounds with UV-Vis spectrophotometer, FTIR spectrophotometer and LC-MS, molecular docking of Moringa leaves flavonoid derivative compounds with 3KC0 protein, and antidiabetic activity test of Moringa leaves extract against male mice. The characterization results show that Moringa leaves extract contains flavonoid derivative compounds, namely myricetin, hesperidin and quercetin. Based on molecular docking, compounds that have potential as antidiabetics are hesperidin compounds with binding energy of -10.03 kcal / mol and amino acid residues on the active side of 3KC0 proteins, namely LEU30, THR27, LYS112 and GLY28. The best compound based on pharmacokinetics is quercetin compound, while the best compound based on toxicity results is hesperidine compound. Antidiabetic activity test showed the optimal dose of Moringa leaves extract in reducing blood glucose levels of male mice was 200 mg/kg body weight and the percentage of glucose reduction (%GL) of 69.56% with a significant value of ANOVA test ($p \leq 0.05$). Therefore, Moringa leaves can be used as an antidiabetic.

Keywords: antidiabetic, moringa leaves, flavonoids, molecular docking, mice.