

ABSTRAK

Tanaman lidah buaya (*Aloe vera*), yang dikenal kaya akan kandungan flavonoid seperti apigenin, kuersetin, dan katekin, menjadi salah satu kandidat potensial dalam pengembangan obat antidiabetes. Tujuan peneliti Menganalisis senyawa flavonoid yang terkandung dalam lidah buaya mempunyai interaksi yang stabil terhadap *Peroxisome Proliferator-Activated Receptor* (PPAR- γ) sehingga dapat diprediksi mempunyai aktivitas sebagai kandidat antidiabetes. Obat berbasis struktur metode desain yang dikenal sebagai *molecular docking* mensimulasikan interaksi molekuler dan memprediksi mode pengikatan dan afinitas antara reseptor dan ligan. Teknik komputasi yang dikenal sebagai *molecular dynamic* (MD) mensimulasikan perilaku dinamis sistem molekuler sebagai fungsi waktu, memperlakukan setiap entitas dalam kotak simulasi (protein, ligan, atau air, jika ada) sebagai fleksibel. Hasil *molecular docking* dari 19 senyawa flavonoid lidah buaya nilai energi ikatan (ΔG) senyawa petunidin dapat dikatakan baik karena memiliki nilai yang terkecil -8,3 mendekati ligan alami. nilai RMSD dan RMSF cukup stabil. *Drug-likeness* senyawa terbaik petunidin memenuhi *kriteria lipinski rule of five*, memiliki profil farmakokinetik yang baik, dan tidak toksik. Penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa flavonoid lidah buaya, khususnya petunidin, berpotensi sebagai kandidat obat antidiabetes dengan menghambat reseptor PPAR- γ .

Kata Kunci : Antidiabetes, Flavonoid lidah buaya, *molecular docking*, *Peroxisome Proliferator-Activated Receptor*.

KARAWANG

ABSTRACT

Aloe vera plants, which are known to be rich in flavonoids such as apigenin, quercetin, and catechins, are one of the potential candidates in the development of antidiabetic drugs. The researcher aims to analyze the flavonoid compounds contained in Aloe vera have a stable interaction with Peroxisome Proliferator-Activated Receptor (PPAR- γ) so that it can be predicted to have activity as an antidiabetic candidate. Structure-based drug design method known as molecular docking simulates molecular interactions and predicts the binding mode and affinity between the receptor and ligand. A computational technique known as molecular dynamics (MD) simulates the dynamic behavior of molecular systems as a function of time, treating each entity in the simulation box (protein, ligand, or water, if present) as flexible. The molecular docking results of 19 aloe vera flavonoid compounds, the bond energy (ΔG) value of petunidin compound can be said to be good because it has the smallest value of -8.3 close to the natural ligand. RMSD and RMSF values are quite stable. Drug-likeness of the best compound petunidine meets the Lipinski rule of five criteria, has a good pharmacokinetic profile, and is not toxic. This study shows that aloe vera flavonoid compounds, especially petunidine, have potential as antidiabetic drug candidates by inhibiting PPAR- γ receptors.

Keywords: Antidiabetes, Aloe vera flavonoids, molecular docking, Peroxisome Proliferator-Activated Receptor.



KARAWANG