

ABSTRAK

Penyakit diabetes menjadi penyebab kematian tertinggi juga penyebab utama dari kebutaan, gagal ginjal, dan penyakit jantung. Daun bawang (*Allium fistulosum* L.) merupakan tanaman yang mengandung senyawa flavonoid dengan potensi aktivitas biologis yang beragam. Studi ini bertujuan untuk melihat interaksi yang stabil dari hasil *docking* antara struktur reseptor kompleks PPAR γ dengan kandidat terbaik senyawa flavonoid pada daun bawang sebagai kandidat antidiabetes. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah metode kuantitatif dan dirancang dengan teknik penambatan molekul (*Molecular Docking*) berbasis komputasi yang dikenal sebagai molekuler dinamik (MD) mensimulasikan perilaku dinamis sistem molekuler sebagai fungsi waktu, memperlakukan setiap entitas dalam kotak simulasi (protein, ligan, atau air, jika ada) sebagai fleksibel. Hasil dari penambatan molekul pada 16 senyawa flavonoid daun bawang terdapat senyawa hesperidin yang memiliki energi bebas gibbs (ΔG) terkecil yaitu -10.0 kkal/mol yang mendekati ligan alami. Nilai RMSD dan RMSF yang cukup stabil. Senyawa hesperidin juga memiliki profil farmakokinetik yang baik dan tidak toksik sehingga memenuhi kriteria *drug-likeness* sebagai kandidat obat oral yang potensial. Temuan ini menunjukkan potensi pengembangan senyawa flavonoid, khususnya senyawa hesperidin dari daun bawang sebagai kandidat obat antidiabetes dengan menghambat reseptor PPAR γ . Penelitian ini memberikan dasar bagi studi lanjutan secara *in vitro* dan *in vivo* untuk validasi aktivitas biologisnya.

Kata Kunci: *Allium fistulosum* L., antidiabetes, senyawa flavonoid, penambatan molekul, PPAR γ reseptor

KARAWANG

ABSTRACT

Diabetes is the leading cause of death as well as the leading cause of blindness, kidney failure, and heart disease. Welsh onion (*Allium fistulosum* L.) is a plant that contains flavonoid compounds with diverse potential biological activities. This study aims to see the stable interaction from the docking results between the PPAR γ complex receptor structure and the best candidates flavonoid compounds in welsh onion as an antidiabetic candidates. The method used in this study is quantitative method and designed with computational-based molecular docking 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 any) as flexible. The result of molecular docking on 16 compounds of welsh onion flavonoids is the hesperidin compound which has the smallest energy binding (ΔG) of -10.0 kcal/mol which is close to the natural ligand. RMSD and RMSF values are quite stable. The hesperidin compound also has a good pharmacokinetic profile and is non-toxic so that it meets the drug-likeness criteria as a potential oral drug candidates. These findings indicate the potential for the development of flavonoid compounds, especially hesperidin compounds from welsh onion as antidiabetic drug candidates by inhibiting PPAR γ receptors. This study provides a basis for further studies in vitro and in vivo to validate its biological activity.

Keywords: *Allium fistulosum* L., antidiabetes, flavonoids, molecular docking, PPAR γ receptor

KARAWANG