

## Studi Penambatan Molekuler Senyawa *Tectoquinone* Terhadap Enzim $\alpha$ -Glukosidase

Ahmad Najib<sup>1\*</sup>, Rais Razak<sup>2</sup>, Izzatul Fikril Mujtahid<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratorium Farmakognosi-Fitokimia, Fakultas Farmasi, Universitas Muslim Indonesia

<sup>2</sup>Laboratorium Kimia Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Muslim Indonesia

| Article info                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | Abstrak                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>History</b><br><i>Submission:</i> 19-01-2023<br><i>Review:</i> 22-04-2023<br><i>Accepted:</i> 04-07-2023<br><br><b>*Email:</b><br><a href="mailto:ahmad.najib@umi.ac.id">ahmad.najib@umi.ac.id</a><br><br><b>DOI:</b> 10.33096/jffi.v10i2.964<br><br>Kata Kunci:<br><i>tectoquinone; Syzygium oblongeolatum (C.B.Rob); <math>\alpha</math>-glucosidase; autodock vina</i> | <i>Investigasi difokuskan pada skrining in silico terhadap senyawa kimia yang diisolasi dari Syzygium oblongeolatum (C.B.Rob) untuk mengidentifikasi potensi senyawa bioaktif yang dapat bertindak sebagai inhibitor <math>\alpha</math>-Glucosidase. Skrining ini melibatkan tectoquinone sebagai inhibitor potensial <math>\alpha</math>-Glucosidase dan menggunakan proses Docking Autodock Vina. Enzim target, <math>\alpha</math>-Glucosidase, digunakan sebagai reseptor dengan 20 situs pengikatan pada reseptor enzim ILWJ dan program Autodock Vina digunakan untuk tujuan ini. Nilai <math>\Delta G_{bind}</math> dan RMSD terendah ditentukan untuk masing-masing dari 20 situs pengikatan yang ditargetkan pada ILWJ, yang mewakili perubahan energi bebas (<math>\Delta G</math>) yang dihasilkan dari docking. Hasil docking menunjukkan perubahan energi bebas (<math>\Delta G</math>) untuk 20 situs pengikatan target berkisar antara -6,346 kkal/mol hingga -9,720 kkal/mol. Perubahan energi bebas (<math>\Delta G</math>) paling menguntungkan terjadi pada situs pengikatan ke-16 dengan nilai -9,720 kkal/mol, sedangkan perubahan energi bebas (<math>\Delta G</math>) tertinggi terjadi pada situs pengikatan ke-18 dengan nilai -6,346 kkal/mol.</i> |
| <b>Keywords:</b><br><i>tectoquinone; Syzygium oblongeolatum (C.B.Rob); <math>\alpha</math>-glucosidase; autodock vina</i>                                                                                                                                                                                                                                                    | <b>Abstract</b><br><i>The investigation focused on conducting an in silico screening of chemical compounds isolated from Syzygium oblongeolatum (C.B.Rob) to identify potential bioactive compounds that could act as inhibitors of <math>\alpha</math>-Glucosidase. This screening involved tectoquinone as the potential inhibitor for <math>\alpha</math>-Glucosidase and employed the Autodock Vina Docking process. The target enzyme, <math>\alpha</math>-Glucosidase, was used as the receptor with 20 binding sites on the enzyme receptor ILWJ and the Autodock Vina program was utilized for this purpose. The values of <math>\Delta G_{bind}</math> and the lowest RMSD were determined for each of the 20 targeted binding sites on ILWJ, representing the free energy change (<math>\Delta G</math>) resulting from the docking. The docking results demonstrated that the free energy change (<math>\Delta G</math>) for the 20 targeted binding sites ranged from -6.346 kcal/mol to -9.720 kcal/mol. The most favorable free energy change (<math>\Delta G</math>) was observed at the 16th binding site with a value of -9.720 kcal/mol, while the highest was recorded at the 18th binding site with a value of -6.346 kcal/mol.</i>                       |

### I. Pendahuluan

Molekular *docking* adalah teknik komputasi yang digunakan untuk menyelidiki interaksi pengikatan antara molekul kecil (Jakhar *et al.*, 2020), seperti senyawa yang ditemukan dalam *Syzygium oblongeolatum* (C.B.Rob), dan protein target khusus, dalam hal ini,  $\alpha$ -glukosidase.  $\alpha$ -glukosidase adalah enzim yang ditemukan dalam sistem pencernaan yang membantu memecah karbohidrat kompleks, seperti pati, menjadi gula sederhana seperti glukosa (Dirir *et al.*, 2022). Aktivitas enzimatik ini terutama terjadi di usus kecil, membantu dalam pencernaan dan penyerapan karbohidrat (Wahyuriyanto, 2022). Penghambat  $\alpha$ -glukosidase digunakan sebagai obat untuk

mengontrol kadar gula darah, terutama pada individu dengan diabetes (Hasan *et al.*, 2023), karena mereka dapat memperlambat pencernaan dan penyerapan karbohidrat, yang menghasilkan kadar gula darah yang lebih stabil setelah makan (Nosa, Karnila and Diharmi, 2020).

*Tectoquinone* adalah salah satu senyawa bioaktif dalam *S. oblongeolatum* (C.B.Rob). Ini adalah senyawa antaquinone yang telah terbukti *tectoquinone* adalah senyawa alami yang sedang diselidiki untuk potensi efek farmakologisnya (Wanschura, 2020). Ini telah menunjukkan potensi dalam beberapa area seperti antioksidan, antiinflamasi (Winiewski *et al.*, 2023), antikanker (Ekiert and Szopa, 2020), antimikroba (Mansour *et*



Copyright © 2023 by Authors. This is an open-access article distributed under the terms of the [Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/)

*al.*, 2023), antidiabetes (Kouamé *et al.*, 2019) dan neuroproteksi (Ekiert and Szopa, 2020). Oleh karena itu, upaya penelitian dilakukan, menggunakan metode *in silico*, untuk mengeksplorasi potensi tectoquinone sebagai penghambat  $\alpha$ -glukosidase.

Penelitian *in silico* melibatkan simulasi berbasis komputer dan pemodelan komputasi untuk menganalisis dan memprediksi interaksi antara berbagai molekul (Jabeen *et al.*, 2020), termasuk tectoquinone yang ditemukan dalam daun *S. oblanceolatum* (C.B.Rob), dan protein targetnya, seperti  $\alpha$ -glukosidase. Pendekatan ini memungkinkan peneliti untuk dengan efisien menguji berbagai senyawa dan menilai potensi mereka sebagai penghambat  $\alpha$ -glukosidase tanpa perlu eksperimen laboratorium yang luas (Wang *et al.*, 2023).

Dengan menggunakan teknik *in silico* seperti molecular docking dan simulasi dinamika molekuler, ilmuwan dapat mengidentifikasi senyawa kandidat yang menjanjikan dalam tectoquinone atau bahkan menyaring senyawa potensial dalam sumber alam lain yang mungkin memiliki efek penghambatan serupa pada  $\alpha$ -glukosidase (Donyapour, 2022). Penelitian *in silico* memainkan peran penting dalam eksplorasi potensi pada daun *S. oblanceolatum* (C.B.Rob) dan penemuan senyawa baru yang mungkin memiliki efek penghambatan  $\alpha$ -glukosidase, yang lebih memahami sifat obat tanaman ini. Tujuannya adalah untuk mempercepat penemuan agen terapeutik atau obat alami potensial untuk DM tipe 2 dan kondisi terkait lainnya.

## II. Metode Penelitian

Penelitian ini dilakukan melalui pendekatan eksploratif dengan menggunakan metode *in silico* dengan melakukan docking menggunakan program Autodock Vina™. Materi yang digunakan dalam penelitian ini adalah tectoquinone. Sampel yang digunakan adalah data senyawa tectoquinone yang dikembangkan dan digambar dalam bentuk 2D dan 3D menggunakan ACD/Chemsketch, Discovery Studio 2.2.1, Ligplot 2.2.8, PyMOL 2.5.5, Autodock Vina 1.2.3, dan Autodock Tools 1.5.7, semuanya dengan lisensi freeware. Penggunaan sistem operasi Windows 11 pada laptop DKKS6A00 dengan spesifikasi prosesor 11th Gen Intel (R) Core(TM) i3-1115G4, RAM 8,00 GB, dan sistem operasi 64-bit, serta prosesor berbasis x64.

Persiapan sampel melibatkan pengambilan struktur protein 1LWJ dari Protein Data Bank (PDB). Selanjutnya, reseptor dalam bentuk makromolekul dipisahkan dari molekul lain yang tidak diperlukan menggunakan Discovery Studio. Pengoptimasian dilakukan dengan penambahan atom hidrogen dan perhitungan Gasteiger menggunakan Autodock Tools. Preparasi ligan asli  $\alpha$ -Glukosidase melibatkan pemisahan ligan dari

molekul lain seperti air dan reseptornya, menggunakan Discovery Studio.

Ligan yang digunakan dalam penelitian ini direkonstruksi menggunakan perangkat lunak ACD/ChemSketch dan disimpan dalam format \*MOL. Struktur ini kemudian dibuka menggunakan perangkat lunak Discovery Studio 2021 Client dan disimpan dalam format \*PDB. Struktur ligan dalam format \*PDB kemudian dioptimasi dengan penambahan atom hidrogen polar dan muatan Gasteiger, serta pengaturan jumlah torsion aktif, dan disimpan dalam format \*PDBQT untuk digunakan dalam simulasi molecular docking (Hamid, Razak and Najib, 2021), (Haerul and Ruhiat, 2021).

Validasi ini dilakukan dengan *re-docking* menggunakan ligan alami. Proses *redocking* dilakukan menggunakan dengan mengatur *grid box* dengan Autodock Tools. Penentuan *grid box* pada reseptor menggunakan Autodock tools dengan cara membuka makromolekul 1LWJ yang telah dipreparasi dan dioptimasi. Kemudian membuka *native ligan*. *Grid box* ditengahkan posisinya pada ligan. Ukur peta *grid box* dan dengan memasukkan titik pencarian posisi kotak (x, y, dan z) yang mencakupi daerah pengikatan ligan dan sesudahnya disimpan (Prasetyawati *et al.*, 2019)

Analisis *molecular docking* dalam penelitian ini mencakup perhitungan energi bebas pengikatan ( $\Delta G_{bind}$ ), Root Mean Square Deviation (RMSD), dan interaksi antara ligan dan residu protein. Konformasi dari setiap ligan yang didokkan diurutkan berdasarkan nilai  $\Delta G_{bind}$ , dari yang terkecil hingga terbesar. Nilai  $\Delta G_{bind}$  yang lebih rendah menunjukkan konformasi yang lebih stabil, sedangkan nilai  $\Delta G_{bind}$  yang lebih tinggi menunjukkan kurangnya stabilitas dalam kompleks yang terbentuk.

RMSD digunakan untuk mengukur keberhasilan prediksi mode pengikatan dan sangat penting untuk memvalidasi program docking (Hamid, Razak and Najib, 2021). Biasanya, nilai RMSD yang baik adalah  $\leq 2$  Å (Diyana, Susanti and Sugihartini, 2021). Deviasi yang lebih besar mengindikasikan kesalahan yang lebih besar dalam memprediksi interaksi ligan-protein. RMSD menggambarkan perbedaan antara konformasi ligan dan konformasi referensi. Biasanya, nilai RMSD yang diperoleh untuk konformasi terbaik dari setiap ligan adalah 0 karena Vina membandingkan setiap konformasi dengan konformasi terbaiknya sendiri.

Selain memeriksa nilai  $\Delta G_{bind}$ , interaksi antara ligan dan residu makromolekul protein juga dianalisis. Identifikasi interaksi ini dilakukan menggunakan Autodocktools untuk visualisasi interaksi ligan-protein dan PyMOL untuk menilai kesesuaian bentuk dan volume antara ligan dan makromolekul protein. Residu protein dikategorikan menjadi lima jenis berdasarkan struktur asam amino mereka: ionik, polar, aromatik, dan hidrofobik.

Residu ionik memberikan kontribusi terbesar dalam menentukan nilai  $\Delta G_{bind}$ , diikuti oleh residu polar, aromatik, dan hidrofobik, secara berurutan.

### III. Hasil dan Pembahasan

Data energi hasil docking pada  $\alpha$ -glukosidase dengan tectoquinone yang diberikan dalam Tabel 1 dan 2 menggambarkan hasil dari simulasi *docking* pada berbagai situs pengikatan atau binding sites yang berbeda di dalam protein  $\alpha$ -glukosidase. Situs-situs pengikatan ini dipertimbangkan dalam rangka mengevaluasi potensi interaksi antara *tectoquinone* dan  $\alpha$ -glukosidase. Dalam analisis ini, beberapa poin penting dapat diidentifikasi.

Pertama, jenis grid dan koordinat pusatnya digunakan untuk menentukan lokasi situs pengikatan di dalam protein  $\alpha$ -glukosidase. Setiap jenis grid mencirikan potensi berbagai lokasi yang dapat berinteraksi dengan tectoquinone.

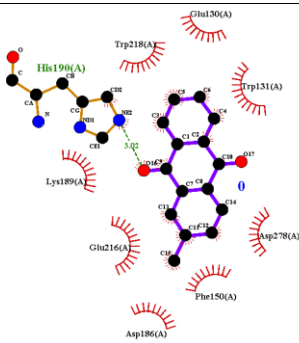
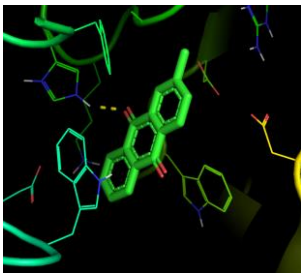
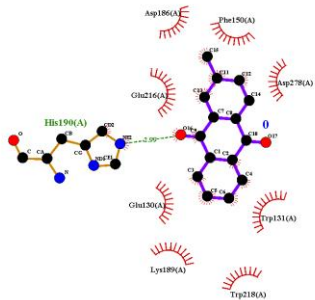
Kemudian, nilai energi ikatan ( $\Delta G_{bind}$ ) diberikan untuk setiap situs pengikatan yang diuji.  $\Delta G_{bind}$  mengukur seberapa kuat interaksi antara tectoquinone dan  $\alpha$ -glukosidase pada masing-masing situs. Nilai  $\Delta G_{bind}$  yang lebih negatif menunjukkan pengikatan yang lebih kuat dan potensi inhibisi yang lebih besar.

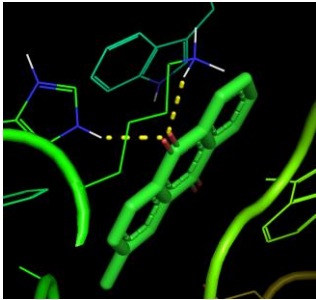
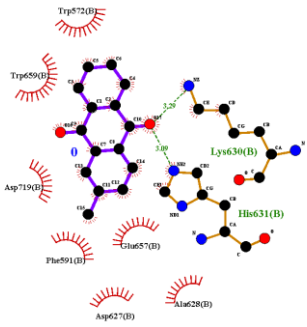
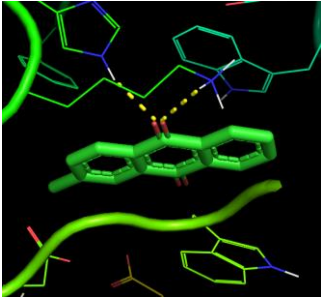
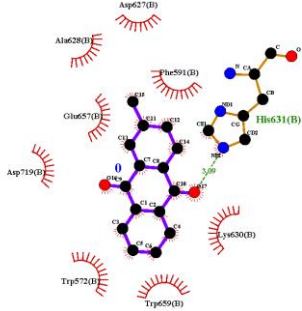
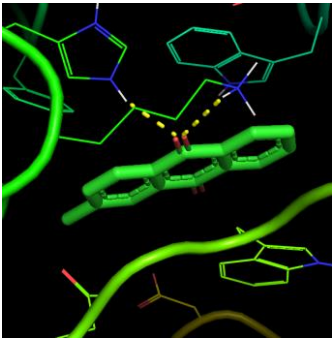
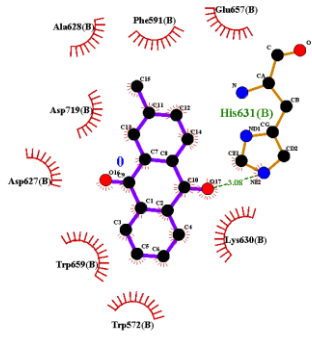
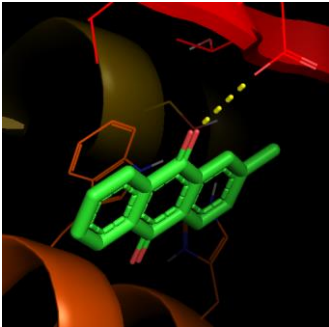
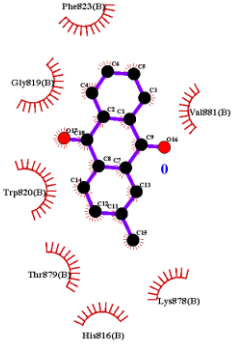
**Tabel 1.** Hasil rendamen ekstrak etanol daun petikan kebo (*Euphorbia hirta*)

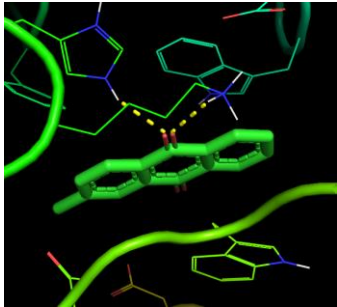
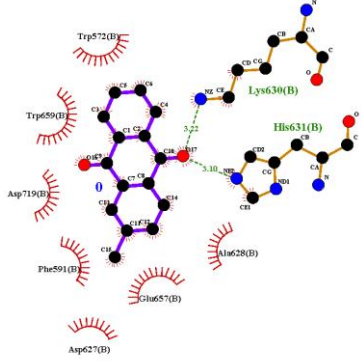
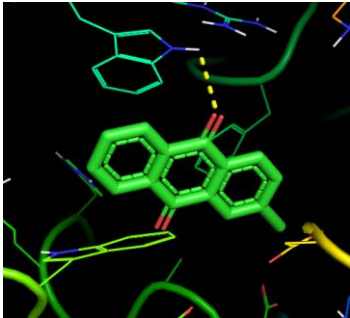
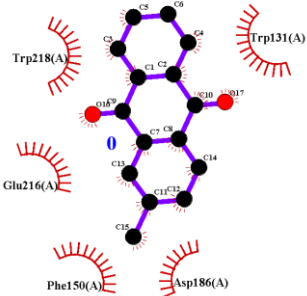
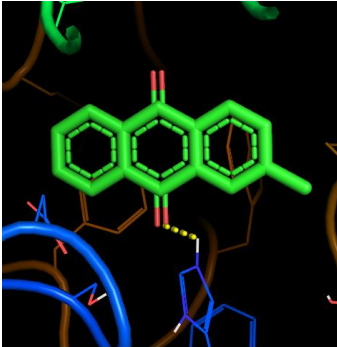
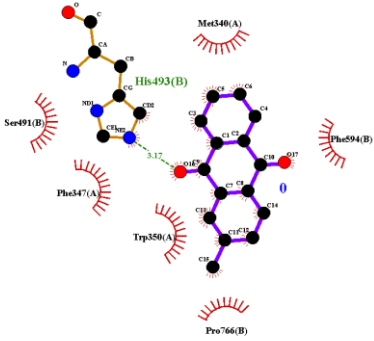
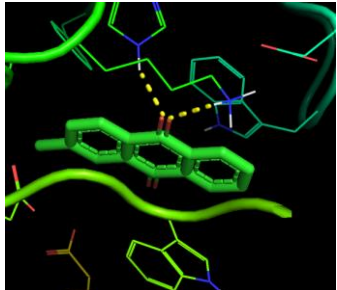
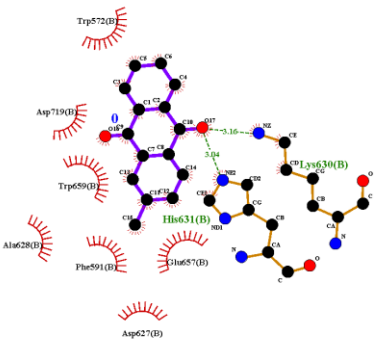
| Jenis Grid                | Koordinat                                                   | Energi Ikatan (Kcal/Mol) |
|---------------------------|-------------------------------------------------------------|--------------------------|
| Grid <i>Native Ligand</i> | Center_X = 35.12<br>Center_Y = 24.41<br>Center_Z = 2.735    | -9.112                   |
| Grid Uji 1                | Center_X = 29.174<br>Center_Y = 23.343<br>Center_Z = 16.242 | -9.116                   |
| Grid Uji 2                | Center_X = 28.457<br>Center_Y = 39.821<br>Center_Z = 16.242 | -9.673                   |
| Grid Uji 3                | Center_X = 28.457<br>Center_Y = 47.273<br>Center_Z = 16.88  | -9.661                   |
| Grid Uji 4                | Center_X = 28.457<br>Center_Y = 47.273<br>Center_Z = 40.467 | -9.657                   |
| Grid Uji 5                | Center_X = 28.457<br>Center_Y = 37.926<br>Center_Z = 51.668 | -6.895                   |
| Grid Uji 6                | Center_X = 19.559<br>Center_Y = 58.323<br>Center_Z = 16.757 | -9.704                   |
| Grid Uji 7                | Center_X = 44.539<br>Center_Y = 42.34<br>Center_Z = -14.523 | -8.598                   |
| Grid Uji 8                | Center_X = 10.553<br>Center_Y = 67.876<br>Center_Z = 3.044  | -8.447                   |
| Grid Uji 9                | Center_X = 10.632<br>Center_Y = 67.876<br>Center_Z = 13.247 | -9.668                   |
| Grid Uji 10               | Center_X = 9.141<br>Center_Y = 67.468<br>Center_Z = 29.304  | -9.698                   |
| Grid Uji 11               | Center_X = 21.836<br>Center_Y = 53.831<br>Center_Z = 42.084 | -9.708                   |
| Grid Uji 12               | Center_X = 21.836<br>Center_Y = 53.831<br>Center_Z = 42.084 | -9.677                   |
| Grid Uji 13               | Center_X = 28.586<br>Center_Y = 50.217<br>Center_Z = 56.628 | -6.889                   |

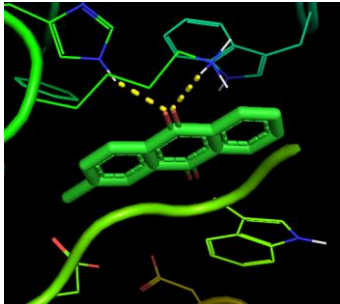
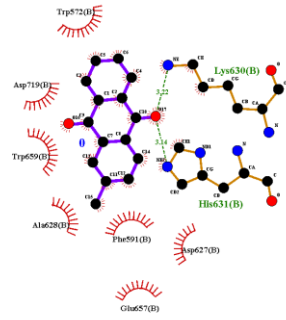
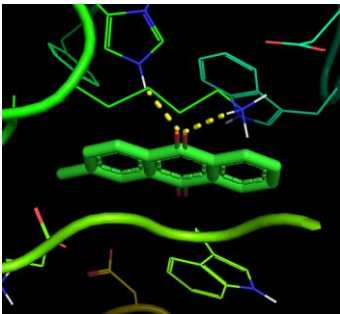
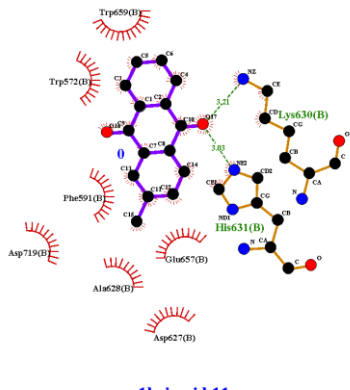
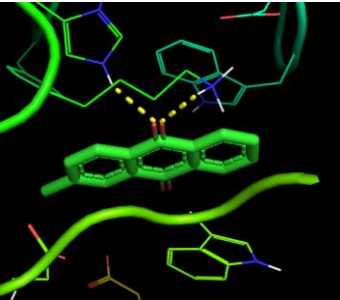
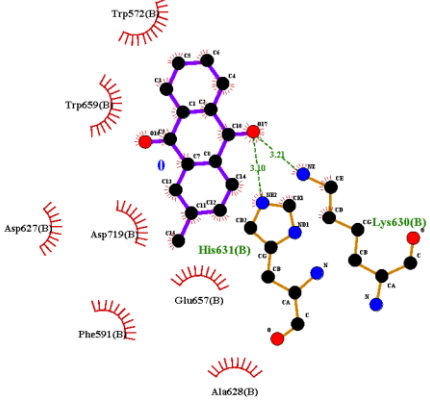
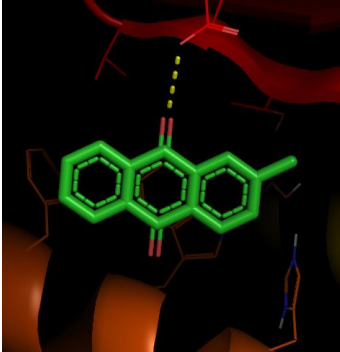
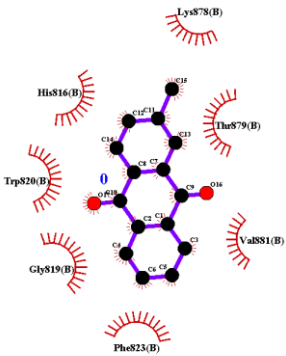
|             |                                                              |        |
|-------------|--------------------------------------------------------------|--------|
| Grid Uji 14 | Center_X = 16.804<br>Center_Y = 45.044<br>Center_Z = 55.576  | -6.913 |
| Grid Uji 15 | Center_X = 21.499<br>Center_Y = 30.375<br>Center_Z = 43.712  | -6.937 |
| Grid Uji 16 | Center_X = 11.499<br>Center_Y = 40.375<br>Center_Z = 28.46   | -9.72  |
| Grid Uji 17 | Center_X = 3.134<br>Center_Y = 30.375<br>Center_Z = 26.345   | -6.631 |
| Grid Uji 18 | Center_X = -0.014<br>Center_Y = 30.375<br>Center_Z = 16.455  | -6.346 |
| Grid Uji 19 | Center_X = 10.292<br>Center_Y = 33.319<br>Center_Z = -2.494  | -7.787 |
| Grid Uji 20 | Center_X = 26.817<br>Center_Y = 34.181<br>Center_Z = -11.938 | -9.092 |

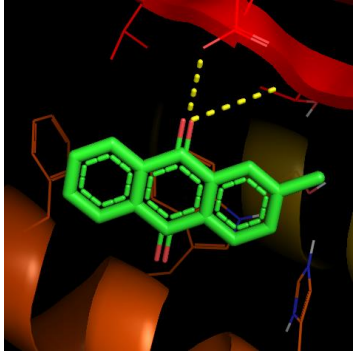
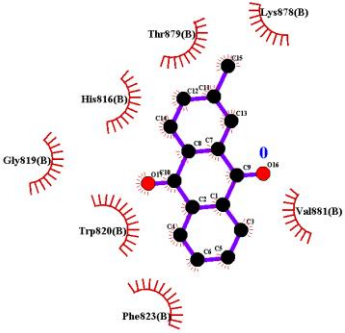
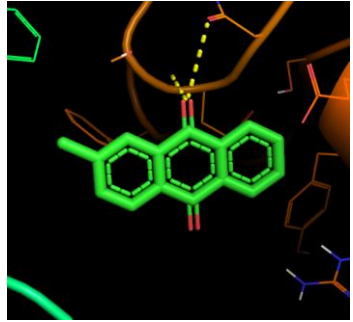
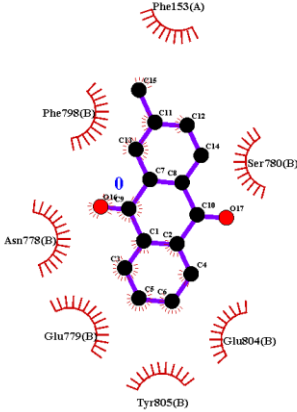
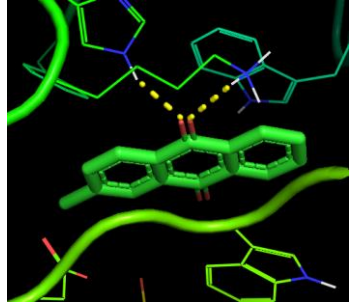
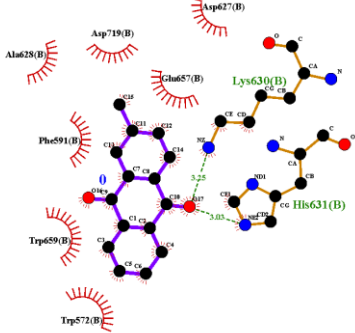
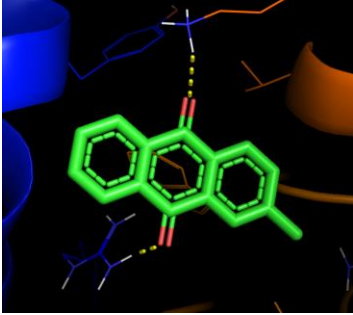
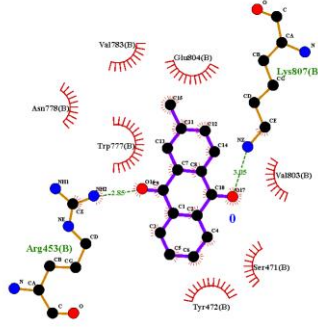
**Tabel 2.** Visualisasi hasil *docking* Pada beberapa *Binding Site*

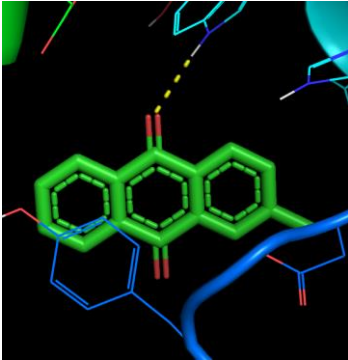
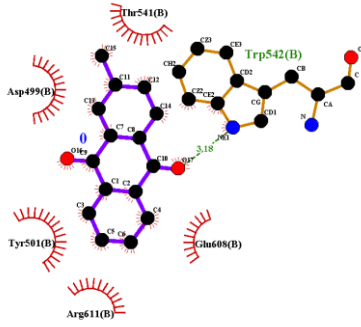
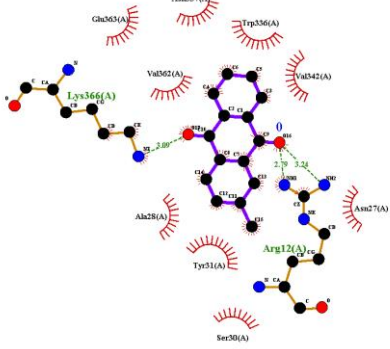
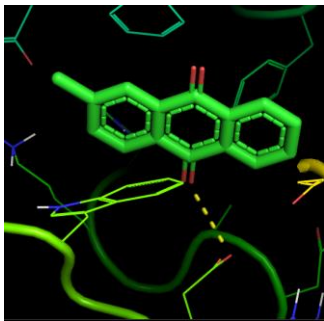
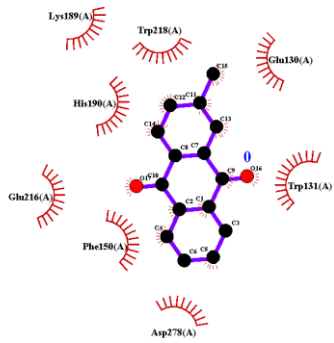
| Grid Uji                 | Visualisasi 3d                                                                      | Visualisasi 2d                                                                                                  |
|--------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Grid <i>Native Ligan</i> |   | <br><b>1hwj-tectoquinone</b> |
| Grid Uji 1               |  | <br><b>1hwj-grid 1</b>      |

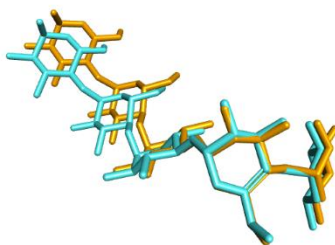
|            |                                                                                     |                                                                                                                 |
|------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Grid Uji 2 |    |  <p><b>1hwj-grid 2</b></p>    |
| Grid Uji 3 |    |  <p><b>1hwj-grid 3</b></p>    |
| Grid Uji 4 |  |  <p><b>1hwj-grid 4</b></p>   |
| Grid Uji 5 |  |  <p><b>1hwj-grid 5</b></p> |

|            |                                                                                     |                                                                                                         |
|------------|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Grid Uji 6 |    |  <p>1lwj-grid 6</p>   |
| Grid Uji 7 |    |  <p>1lwj-grid 7</p>   |
| Grid Uji 8 |  |  <p>1lwj-grid 8</p> |
| Grid Uji 9 |  |  <p>1lwj-grid 9</p> |

|             |                                                                                     |                                                                                                                 |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Grid Uji 10 |    |  <p><b>1hwj-grid 10</b></p>   |
| Grid Uji 11 |    |  <p><b>1hwj-grid 11</b></p>   |
| Grid Uji 12 |  |  <p><b>1hwj-grid 12</b></p> |
| Grid Uji 13 |  |  <p><b>1hwj-grid 13</b></p> |

|             |                                                                                     |                                                                                                          |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Grid Uji 14 |    |  <p>1lwj-grid 14</p>   |
| Grid Uji 15 |   |  <p>1lwj-grid 15</p>  |
| Grid Uji 16 |  |  <p>1lwj-grid 16</p> |
| Grid Uji 17 |  |  <p>1lwj-grid 17</p> |

|             |                                                                                     |                                                                                                                |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Grid Uji 18 |    |  <p><b>1lwj-grid 18</b></p>  |
| Grid Uji 19 |    |  <p><b>1lwj-grid 19</b></p>  |
| Grid Uji 20 |  |  <p><b>1lwj-grid20</b></p> |



**Gambar 2.** Hasil tumpang tindih antara ligan akarbose sebelum (warna biru) dan sesudah (warna jingga)

Dari hasil ini, beberapa situs pengikatan, seperti Grid Uji 1, 2, dan 3, menunjukkan nilai  $\Delta G_{bind}$  yang memiliki nilai pada kisaran -9 Kcal/mol, menandakan adanya potensi interaksi yang kuat antara *tectoquinone* dan  $\alpha$ -glukosidase pada situs-situs ini. Hal ini dapat dianggap sebagai

hasil yang menggembirakan dalam pencarian potensi penghambat  $\alpha$ -glukosidase.

Perbandingan antara situs pengikatan juga penting. Situs dengan nilai  $\Delta G_{bind}$  yang lebih negatif dapat dianggap sebagai target yang lebih menjanjikan untuk *tectoquinone*. Namun, semua situs pengikatan memerlukan analisis lebih lanjut

untuk memahami mekanisme interaksi yang mungkin terjadi.

Selanjutnya, hasil ini perlu divalidasi dengan eksperimen laboratorium atau hasil *docking* dengan ligan lain untuk meningkatkan kepercayaan terhadap temuan ini (seperti yang tampak pada Gambar 1). Validasi merupakan langkah penting dalam penelitian ini.

Dalam keseluruhan, data energi hasil *docking* ini menjadi landasan awal yang penting dalam mengevaluasi potensi *tectoquinone* sebagai penghambat  $\alpha$ -glukosidase. Hasil ini akan membantu dalam perencanaan penelitian lanjutan dan pengembangan terapi potensial berbasis *tectoquinone* untuk pengobatan diabetes tipe 2 atau kondisi terkait lainnya.

Dalam analisis docking ini, kita dapat melihat perbedaan yang signifikan dalam energi ikatan ( $\Delta G_{bind}$ ) antara berbagai situs pengikatan *tectoquinone* pada protein  $\alpha$ -glukosidase. Nilai terendah tercatat pada "Grid Uji 16" dengan koordinat pusat X = 11.499, Y = 40.375, Z = 28.46, yang menunjukkan nilai  $\Delta G_{bind}$  sebesar -9.720 Kcal/mol. Nilai ini sangat negatif, menunjukkan adanya potensi pengikatan yang sangat kuat antara *tectoquinone* dan  $\alpha$ -glukosidase pada situs ini. Dari nilai ini, kita dapat menyimpulkan bahwa "Grid Uji 16" adalah salah satu situs pengikatan yang paling menjanjikan untuk *tectoquinone*, dan *tectoquinone* mungkin berperan sebagai penghambat  $\alpha$ -glukosidase yang kuat pada situs ini.

Di sisi lain, nilai tertinggi tercatat pada "Grid Uji 18" dengan koordinat pusat X = -0.014, Y = 30.375, Z = 16.455, dengan nilai  $\Delta G_{bind}$  sebesar -6.346 Kcal/mol. Nilai ini lebih positif daripada yang terendah, menunjukkan potensi pengikatan yang lebih lemah pada situs pengikatan ini. Hal ini mungkin menandakan bahwa "Grid Uji 18" memiliki interaksi yang kurang stabil atau kuat dengan *tectoquinone*. Meskipun nilai  $\Delta G_{bind}$  lebih positif, situs pengikatan ini masih menunjukkan potensi interaksi antara *tectoquinone* dan  $\alpha$ -glukosidase.

#### IV. Kesimpulan

Secara keseluruhan, hasil docking mengungkapkan bahwa *tectoquinone* dapat berinteraksi dengan berbagai situs pengikatan di  $\alpha$ -glukosidase. Situs pengikatan dengan  $\Delta G_{bind}$  sangat negatif, seperti "Grid Uji 16," memiliki potensi terbesar untuk pengembangan *tectoquinone* sebagai penghambat  $\alpha$ -glukosidase yang kuat. Meskipun situs dengan  $\Delta G_{bind}$  lebih positif (seperti "Grid Uji 18") juga menunjukkan potensi, kemungkinan memerlukan modifikasi lebih lanjut. Hasil ini memberikan pandangan awal penting dalam pemilihan situs pengikatan yang paling menjanjikan dan berpotensi untuk pengembangan obat terkait diabetes tipe 2 atau kondisi serupa.

#### Daftar Pustaka

- Dirir, A. M. *et al.* (2022) 'A review of alpha-glucosidase inhibitors from plants as potential candidates for the treatment of type-2 diabetes', *Phytochemistry Reviews*. Springer, 21(4), pp. 1049–1079.
- Diyan, D. S. P., Susanti, H. and Sugihartini, N. (2021) 'Molecular Docking As Potential Anti-Inflamed Quersetin of Moringa Leaves (*Moringa oleifera* L.) With Autodock-Vina', *Jurnal Ilmiah Manusia Dan Kesehatan*, 4(2), pp. 309–313.
- Donyapour, N. (2022) *Predicting the Properties of Ligands Using Molecular Dynamics and Machine Learning*. Michigan State University.
- Ekiert, H. M. and Szopa, A. (2020) 'Biological activities of natural products', *Molecules*. Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI), 25(23), pp. 1–7. doi: 10.3390/molecules25235769.
- Haerul, D. S. and Ruhiat, G. (2021) 'Studi In Silico Senyawa Fenolik Madu sebagai Kandidat Inhibitor Mpro SARS-CoV-2', *Media Penelitian dan Pengembangan Kesehatan*, 31(3), pp. 213–232.
- Hamid, N., Razak, R. and Najib, A. (2021) *Virtual Screening Pada Senyawa Kimia Tumbuhan Terap (Artocarpus Elasticus) Terhadap Reseptor Alpha Estrogen*. Penerbit NEM.
- Hasan, T. *et al.* (2023) 'Phytochemicals from Zingiber capitatum rhizome as potential  $\alpha$ -glucosidase,  $\alpha$ -amylase, and glycogen phosphorylase inhibitors for the management of Type-II diabetes mellitus: Inferences from in vitro, in vivo and in-silico investigations', *Arabian Journal of Chemistry*. Elsevier, 16(10), p. 105128.
- Jabeen, F. *et al.* (2020) 'Computational modeling for bionanocomposites', *Bionanocomposites*. Elsevier, pp. 367–420.
- Jakhar, R. *et al.* (2020) 'Relevance of molecular docking studies in drug designing', *Current Bioinformatics*. Bentham Science Publishers, 15(4), pp. 270–278.
- Kouamé, B. K. F. P. *et al.* (2019) 'A novel anthraquinone from *Morinda lucida* Benth (Rubiaceae)', *Journal of Pharmacognosy and Phytochemistry*. AkiNik Publications, 8(4), pp. 11–14.
- Mansour, M. M. A. *et al.* (2023) 'Long-term fungal inoculation of *Ficus sycomorus* and *Tectona grandis* woods with *Aspergillus flavus* and *Penicillium chrysogenum*', *Scientific Reports*. Nature Publishing Group UK London, 13(1), p. 10453.
- Nosa, S. P., Karnila, R. and Diharmi, A. (2020)

- ‘Potensi kappa karaginan rumput laut (*Eucheuma cottonii*) sebagai antioksidan dan inhibitor enzim  $\alpha$ -glukosidase’, *Berkala Perikanan Terubuk*, 48(2), pp. 434–449.
- Prasetyawati, R. *et al.* (2019) ‘Studi Penambatan Molekul Senyawa Turunan Xanton Dari Kulit Buah Manggis (*Garcinia mangostana* L.) Terhadap Er- $\alpha$  (Reseptor Estrogen Alfa) Dan Er- $\beta$  (Reseptor Estrogen Beta) Sebagai Antikanker Payudara’, *Jurnal Ilmiah Farmako Bahari*, 9(1), pp. 45–52.
- Wahyurianto, Y. (2022) *Absorpsi Glukosa: Studi Kasus pada Tikus Putih (Rattus Norvegicus)*. Penerbit Adab.
- Wang, H. *et al.* (2023) ‘Scientific discovery in the age of artificial intelligence’, *Nature*. Nature Publishing Group UK London, 620(7972), pp. 47–60.
- Wanschura, R. V. (2020) *Isolation, Separation and Bioactivity of Wood Extracts*. Technische Universität München.
- Winiewski, V. *et al.* (2023) ‘Three new naphthoquinones from the tubers of *Sinningia mauroana*’, *Natural Product Research*. Taylor & Francis, 37(2), pp. 263–268.

