

Studi *In Silico* Senyawa *Hylocereus polyrhizus* dan *Allium sativum* terhadap Enzim HMG-CoA Reduktase

Normaidah^{1*}, Dian Nurmansyah²

¹Program Studi Pendidikan Profesi Apoteker, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lambung Mangkurat, Banjarbaru, Kalimantan Selatan, Indonesia

²Program Studi D-III Teknologi Laboratorium Medik, Akademi Analis Kesehatan Borneo Lestari, Banjarbaru, Kalimantan Selatan, Indonesia

Email: normaidah@ulm.ac.id

ABSTRAK

Ekstrak buah naga merah (*Hylocereus polyrhizus*) dan ekstrak bawang putih (*Allium sativum*) diketahui mampu menurunkan kadar kolesterol total darah dalam studi *in vivo*. Penambatan molekul dapat dilakukan dalam memprediksi senyawa yang bertanggung jawab berdasarkan nilai *docking*. Tujuan dari penelitian ini adalah mengetahui zat aktif potensial dari *H. polyrhizus* dan *A. sativum* yang berperan penting dalam penurunan kadar kolesterol darah melalui jalur inhibisi enzim HMG-CoA reduktase dalam uji *in silico*. Reseptor yang digunakan adalah enzim HMG-CoA reduktase (PDB ID: 1HW9) dengan ligan natif simvastatin yang dipreparasi menggunakan YASARA. Struktur senyawa aktif sebanyak 19 senyawa dari buah *H. polyrhizus* 17 dari *A. sativum* digambar menggunakan MarvinSketch pada pH 7,4 dengan 10 bentuk konformasi. Proses penambatan molekul dilakukan menggunakan program PLANTS dan divisualisasi dengan Discovery Studio Visualizer. Ligan natif menunjukkan nilai RMSD sebesar 1,5265 Å dengan nilai *docking* -79,1320. Senyawa 4, dan 17 pada buah *H. polyrhizus* serta senyawa 36 pada *A. sativum* menunjukkan kedekatan relative dengan ligan natif lebih dari 95%. Senyawa ini diprediksi mampu menurunkan kadar kolesterol total darah dengan penghambatan enzim HMG-CoA reduktase secara penambatan molekul.

Kata Kunci: Buah Naga Merah, Bawang Putih, Vitamin E, Antilipidemia, Kolesterol Total