

**STUDI *IN-SILICO* SENYAWA AKTIF YANG TERKANDUNG
DALAM KAYU MANIS (*Cinnamomun burmanni*)
SEBAGAI KANDIDAT ANTIDIABETES**

SKRIPSI

**Di ajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar
Sarjana Farmasi**



DE HIBAN FAUZAN MABRURO

31120122

PROGRAM STUDI S1 FARMASI

FAKULTAS FARMASI

UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA

TASIKMALAYA

JULI 2024

ABSTRAK

STUDI *IN-SILICO* SENYAWA AKTIF YANG TERKANDUNG DALAM KAYU MANIS (*Cinnamomun burmanni*) SEBAGAI KANDIDAT ANTIDIABETES

De Hiban Fauzan Mabruro

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Tanaman obat yang dapat dimanfaatkan sebagai pengobatan antidiabetes mellitus salah satunya kayu manis (*Cinnamomun burmanni*). Diabetes melitus (DM) merupakan penyakit kronis yang disebabkan oleh metabolisme sehingga meningkatkan kadar gula darah. Tujuan dari penelitian ini untuk mengetahui aktivitas antidiabetes mellitus tipe 2 dari senyawa yang terkandung dalam tanaman kayu manis (*Cinnamomun burmanni*) dan ikatan yang terjadi antara senyawa yang terkandung dalam kayu manis secara *in silico*. Metode yang digunakan ialah studi komputasi dengan molekular *docking*, Uji pkCSM, uji *Drug Scan* dan simulasi molekular dinamis. Hasil dari studi komputasi molekular *docking* dari 21 senyawa kayu manis menunjukkan bahwa dua senyawa yang memiliki ikatan-ikatan terkuat dibandingkan dengan senyawa lainnya adalah Kaempferol dan Linalool dari hasil *docking* dengan (kode PDB 2JKE). Pengujian pkCSM dari kedua senyawa memiliki hasil yang baik tidak toksik. Hasil uji *Drug Scan* menunjukkan bahwa dari 21 senyawa memenuhi syarat kecuali senyawa Procyanidin dimer dari kriteria parameter uji tersebut. Hasil *dynamica molecular* pada senyawa Linalool selama 100 ns menunjukkan nilai RMSD dan RMSF yang baik dan bisa dijadikan sebagai penemuan obat baru antidiabetes.

Kata Kunci : Kayu Manis, Antidiabetes, *In Silico*

Abstrac

Medicinal plants that can be used as treatments for diabetes mellitus include cinnamon (Cinnamomun burmanni). Diabetes mellitus (DM) is a chronic disease caused by metabolic issues, leading to elevated blood sugar levels. The aim of this research is to investigate the antidiabetic activity of compounds found in the cinnamon plant (Cinnamomun burmanni) and the interactions between these compounds in silico. The methods used include computational studies with molecular docking, pkCSM testing, Drug Scan testing, and molecular dynamics simulations. The results of the molecular docking computational study of 21 cinnamon compounds identified two compounds with the best binding affinity: Kaempferol and Linalool, from docking with (PDB code 2JKE). pkCSM testing of both compounds showed good results, indicating they are non-toxic. The Drug Scan test results indicated that, out of the 21 compounds, all met the criteria except for Procyanidin dimer. The molecular dynamics results for Linalool over 100 ns showed good RMSD and RMSF values, suggesting it could be considered a new antidiabetic drug discovery.

Keywords : cinnamon, antidiabetic, *in silico*