

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
BAWANG PUTIH (*Allium sativum* L.) SEBAGAI
ANTIDIABETES**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar
Sarjana Farmasi**



DWI WIDYANINGSIH

31120069

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
AGUSTUS 2024**

ABSTRAK

Studi *In Silico* Senyawa Yang Terkandung Dalam Bawang Putih (*Allium sativum* L.) Sebagai Antidiabetes

Dwi Widyarningsih

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Diabetes melitus adalah kondisi metabolik yang ditandai dengan hiperglikemia akibat gangguan pada kerja insulin, sekresi insulin, atau keduanya. Bawang putih (*Allium sativum* L.) diketahui memiliki potensi sebagai terapi antidiabetes. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi aktivitas antidiabetes dan interaksi senyawa dari bawang putih sebagai calon obat antidiabetes. Metode yang digunakan meliputi studi komputasi melalui *molecular docking*, uji pkCSM, dan simulasi *molecular dynamics*. Dari 44 senyawa bawang putih yang dianalisis, *molecular docking* mengidentifikasi dua senyawa terbaik untuk reseptor 3CCB, yaitu *s*-allyl mercapto glutathione dan gamma-glutamyl cysteine, serta tiga senyawa terbaik untuk reseptor 1X70, yaitu hesperidin, asam galic, dan rutin. Senyawa ini menunjukkan nilai *PLANTS Score* yang rendah, menandakan interaksi yang kuat dengan reseptor. Berdasarkan parameter *Lipinski's Rule of Five*, dua senyawa tidak memenuhi kriteria tersebut. Uji ADMET menunjukkan bahwa dua senyawa memiliki potensi hepatotoksitas. Simulasi *molecular dynamics* menunjukkan bahwa nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*) dan RMSF (*Root Mean Square Fluctuation*) dari senyawa-senyawa tersebut stabil selama 100 ns.

Kata kunci : Diabetes melitus, Bawang Putih, *Molecular Docking*

ABSTRACT

Diabetes mellitus is a metabolic condition characterized by hyperglycemia due to impaired insulin function, insulin secretion, or both. Garlic (Allium sativum L.) is known to have potential as an antidiabetic therapy. This study aims to evaluate the antidiabetic activity and interactions of compounds from garlic as candidates for antidiabetic drugs. The methods used include computational studies through molecular docking, pkCSM tests, and molecular dynamics simulations. Of the 44 garlic compounds analyzed, molecular docking identified two best compounds for the 3CCB receptor, namely s-allyl mercapto glutathione and gamma-glutamyl cysteine, and three best compounds for the 1X70 receptor, namely hesperidin, gallic acid, and routine. These compounds showed low PLANTS Score values, indicating strong interactions with the receptor. Based on Lipinski's Rule of Five parameters, two compounds did not meet the criteria. The ADMET test showed two compounds had the potential for hepatotoxicity. Molecular dynamics simulations show that the RMSD (Root Mean Square Deviation) and RMSF (Root Mean Square Fluctuation) values of the compound are stable for 100 ns

Keywords: Diabetes mellitus, Garlic, Molecular Docking