

**STUDI *IN-SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG
DALAM TANAMAN SAMBILOTO (*Andrographis paniculata*
Nees.) SEBAGAI KANDIDAT ANTIDIABETES**

SKRIPSI

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



**SITI SILMI NAFILAH
31120009**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
2023**

ABSTRAK

Studi *in-Silico* senyawa yang terkandung dalam Tanaman Sambiloto (*Andrographis paniculata* Nees.) sebagai Kandidat Antidiabetes

Siti Silmi Nafilah

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Diabetes melitus merupakan penyakit kronis yang dapat menurunkan kualitas hidup penderitanya. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi sambiloto (*Andrographis Paniculata* Nees.) sebagai alternatif pengobatan diabetes melitus melalui pendekatan *in silico*. Metode yang digunakan adalah molecular docking dan simulasi dinamika molekuler terhadap 23 senyawa aktif sambiloto pada reseptor DPP-4. Hasil penelitian menunjukkan bahwa beberapa senyawa dalam sambiloto memiliki kemampuan menghambat aktivitas DPP-4. Dua reseptor (3CCB dan 5J3J) divalidasi dengan RMSD kurang dari 2 Å. Tiga senyawa terbaik diidentifikasi: neoandrographolide, phytol dan 2-tran-6-trans farnesol (untuk 3CCB), serta daukosterol, bisandrographolide dan neoandrographolide (untuk 5J3J). Uji *drug scan* menunjukkan 19 dari 23 senyawa memenuhi aturan Lipinski. Simulasi dinamika molekuler selama 100 ns menunjukkan kestabilan interaksi senyawa-reseptor. Kesimpulannya, beberapa senyawa dalam sambiloto berpotensi sebagai agen antidiabetes melalui penghambatan DPP-4, yang dapat meningkatkan sekresi insulin dan menurunkan sekresi glukagon. Penelitian lebih lanjut diperlukan untuk mengonfirmasi temuan ini secara eksperimental.

Kata kunci : Diabetes melitus, sambiloto, *in silico*, DPP-4, molecular docking

Abstract

Diabetes mellitus is a chronic disease that can reduce the sufferer's quality of life. This study aims to evaluate the potential of Sambiloto (Andrographis Paniculata Nees.) as an alternative treatment for diabetes mellitus using an in silico approach. The method used is molecular docking and molecular dynamics simulations of 23 active compounds of Sambiloto on the DPP-4 receptor. The research results show that several compounds in bitter have the ability to inhibit DPP-4 activity. Two receptors (3CCB and 5J3J) were validated with RMSD less than 2 Å. Three best compounds were identified: neoandrographolide, phytol and 2-tran-6-trans farnesol (for 3CCB), as well as daukosterol, bisandrographolide and neoandrographolide (for 5J3J). The drug scan test showed that 19 of the 23 compounds met Lipinski's rules. Molecular dynamics simulations for 100 ns show the stability of the compound-receptor interaction. In conclusion, several compounds in bitter have the potential to act as antidiabetic agents through inhibiting DPP-4, which can increase insulin secretion and reduce glucagon secretion. Further research is needed to confirm these findings experimentally.

Keywords: Diabetes melitus, sambiloto, *in silico*, DPP-4, docking molekuler

