

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM DAUN
KELOR (*Moringa Oleifera* L)
SEBAGAI DIABETES MELITUS**

SKIRIPSI

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



VIANI YUNIA RISMAYANTI

31120226

PROGRAM STUDI S1 FARMASI

FAKULTAS FARMASI

UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA

TASIKMALAYA

AGUSTUS 2024

ABSTRAK

Diabetes mellitus adalah penyakit yang disebabkan oleh kadar insulin yang tidak mencukupi. Daun kelor (*Moringa oleifera L.*) dikenal memiliki potensi sebagai pengobatan diabetes mellitus. Penelitian ini bertujuan untuk menyelidiki aktivitas antidiabetes dan interaksi dari senyawa-senyawa yang terdapat dalam daun kelor sebagai kandidat pengobatan diabetes. Metode yang digunakan meliputi studi komputasi dengan molecular docking, uji pkCSM, dan simulasi dinamika molekuler. Hasil dari studi molecular docking mengidentifikasi reseptor 2JKE dengan dua senyawa utama: benzyl-glucosinolate dan kaempferol, serta reseptor 3W37 dengan senyawa unggulan: niazidin dan niazimin. Senyawa-senyawa ini menunjukkan skor PLANTS yang lebih tinggi dibandingkan ligan alami dan dianggap sebagai kandidat kuat untuk berinteraksi dengan reseptor-reseptor tersebut. Namun, hasil simulasi dinamika molekuler selama 10 ns menunjukkan nilai RMSD dan RMSF yang kurang optimal untuk semua senyawa.

Kata kunci: Diabetes, Daun Kelor, *Molecular docking*

Abstract

Diabetes mellitus is a disease caused by insufficient insulin levels. Moringa leaves (*Moringa oleifera L.*) are recognized for their potential in treating diabetes mellitus. This study aims to investigate the antidiabetic properties and the interactions of the compounds present in Moringa leaves as potential treatments for diabetes. The research employs methods such as computational studies using molecular docking, pkCSM testing, and molecular dynamics simulations. Computational molecular docking results identified receptor 2JKE with two top compounds: benzyl-glucosinolate and kaempferol, and receptor 3W37 with the leading compounds: niazidin and niazimin. These compounds exhibit PLANTS scores higher than natural ligands and are considered strong candidates for interaction with these receptors. However, molecular dynamics simulations over 10 ns showed suboptimal RMSD and RMSF values for all compounds.

Keywords: *Diabetes, Moringa leaves, Molecular docking*