

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
DAUN SALAM (*Syzygium polyanthum* (Wight.) Walp.)
DALAM MENGHAMBAT ENZIM α -GLUKOSIDASE**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar Sarjana Farmasi



DIVA FAJRIN NURUL SYAMSI

31121064

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

2025

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
DAUN SALAM (*Syzygium polyanthum* (Wight.) Walp.)
DALAM MENGHAMBAT ENZIM α -GLUKOSIDASE**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar Sarjana Farmasi



DIVA FAJRIN NURUL SYAMSI

31121064

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

2025

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM DAUN SALAM (*Syzygium polyanthum* (Wight.) Walp.) DALAM MENGHAMBAT ENZIM α -GLUKOSIDASE

Diva Fajrin Nurul Syamsi

Program Studi S1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

ABSTRACT

Type 2 diabetes mellitus (DM) is a chronic metabolic disorder with a continuously increasing prevalence globally. One therapeutic strategy is to inhibit the action of the α -glucosidase enzyme to control blood glucose levels. This study aims to identify potential α -glucosidase inhibitors from active compounds contained in bay leaves (*Syzygium polyanthum*) *in silico*. A total of 20 compounds were tested through molecular docking stages using AutodockTools and visualized with Discovery Studio. The docking results showed that five compounds, namely α -tocopherol (–7.21 kcal/mol), γ -tocopherol (–6.68 kcal/mol), α -humulene (–6.52 kcal/mol), nerolidol (–6.44 kcal/mol), and farnesol (–6.24 kcal/mol) have a stronger binding affinity compared to the reference drug acarbose (–5.81 kcal/mol). Molecular dynamics simulations confirmed the stability of the ligand-receptor complex interaction. ADMET analysis and Lipinski's rule analysis showed that most compounds had favorable pharmacokinetic profiles. This study concluded that bay leaf compounds have potential as α -glucosidase inhibitor-based antidiabetic drug candidates.

Keywords: α -glucosidase, *Syzygium polyanthum*, molecular docking, *in silico*, diabetes, drug discovery

ABSTRAK

Diabetes mellitus (DM) tipe 2 merupakan gangguan metabolik kronis dengan prevalensi yang terus meningkat secara global. Salah satu strategi terapi adalah menghambat kerja enzim α -glukosidase untuk mengontrol kadar glukosa darah. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi potensi inhibitor α -glukosidase dari senyawa-senyawa aktif yang terkandung dalam daun salam (*Syzygium polyanthum* (Wight.) Walp.) secara *in silico*. Sebanyak 20 senyawa diuji melalui tahapan molecular docking menggunakan AutodockTools dan Divisualisasikan dengan Discovery Studio. Hasil docking menunjukkan bahwa lima senyawa, yaitu α -tocopherol (–7,21 kkal/mol), γ -tocopherol (–6,68 kkal/mol), α -humulene (–6,52 kkal/mol), nerolidol (–6,44 kkal/mol), dan farnesol (–6,24 kkal/mol) memiliki afinitas ikatan lebih kuat dibandingkan dengan obat pembanding acarbose (–5,81 kkal/mol). Simulasi dinamika molekuler mengkonfirmasi kestabilan interaksi kompleks ligan–reseptor. Analisis ADMET dan pemenuhan aturan Lipinski menunjukkan bahwa sebagian besar senyawa memiliki profil farmakokinetik yang baik. Penelitian ini menyimpulkan bahwa senyawa daun salam memiliki potensi sebagai kandidat obat antidiabetes berbasis inhibitor α -glukosidase.

Kata kunci: α -glukosidase, daun salam, molecular docking, diabetes, *in silico*, *Syzygium polyanthum*

