

**STUDI *IN SILICO* INTERAKSI SENYAWA BIOAKTIF DARI TEH
(*Camellia sinensis* (Linnaeus.) Kuntze) TERHADAP INSULIN
UNTUK PENGEMBANGAN TERAPI ANTI DIABETES MELITUS
TIPE 2**

SKRIPSI

Diajukan Sebagai Salah Satu Syarat Untuk Memperoleh Gelar Sarjana



CAHYA KAMILA

31121028

**PROGRAM STUDI FARMASI FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA 2024/2025**

ABSTRAK

Diabetes melitus tipe 2 (Diabetes Melitus tipe 2) merupakan gangguan metabolik kronis yang ditandai oleh resistensi insulin dan hiperglikemia. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengevaluasi potensi senyawa bioaktif dari daun teh (*Camellia sinensis* (L.) Kuntze) sebagai kandidat metode alternatif untuk mengobati diabetes melitus tipe 2 melalui pendekatan *in silico*. Senyawa yang diuji meliputi polifenol seperti Epigallocatechin gallate (EGCG), Epicatechin gallate (ECG), Quercetin, dan lainnya. Reseptor yang digunakan adalah alpha-glucosidase (PDB ID: 3POC). Proses *molecular docking* dilakukan menggunakan AutoDockTools, sedangkan simulasi dinamika molekul menggunakan Desmond. Hasil *docking* menunjukkan bahwa EGCG dan ECG memiliki afinitas ikatan tertinggi dengan nilai energi bebas (ΔG) sebesar -5,87 dan -5,84 kkal/mol. Nilai RMSD validasi metode sebesar 0,56 Å menunjukkan keandalan simulasi. Prediksi tentang farmakokinetik dan toksisitas menggunakan pkCSM mengindikasikan bahwa beberapa senyawa memiliki profil ADME yang baik dan risiko toksisitas yang rendah. Simulasi dinamika molekul mendukung stabilitas kompleks protein-ligan. Penelitian ini menyimpulkan bahwa senyawa polifenol dari teh memiliki potensi sebagai inhibitor alpha-glucosidase dan layak dikembangkan sebagai kandidat terapi pendamping untuk diabetes melitus tipe 2 melalui pendekatan komputasi.

Kata kunci: **Diabetes Melitus Tipe 2, Camellia sinensis, Polifenol, Docking Molekuler, In Silico .**

ABSTRACT

Type 2 diabetes mellitus (Type 2 Diabetes Mellitus) is a chronic metabolic disorder characterized by insulin resistance and hyperglycemia. The purpose of this study is to assess the potential of bioactive substances from tea (*Camellia sinensis* (L.) Kuntze) as alternative therapeutic candidates for DM type 2 using an *in silico* approach. Tested compounds included polyphenols such as Epigallocatechin gallate (EGCG), Epicatechin gallate (ECG), Quercetin, and others. The target receptor used was alpha-glucosidase (PDB ID: 3POC). Molecular docking was conducted using AutoDockTools, and molecular dynamics simulations were performed using Desmond. Docking results showed that EGCG and ECG had the strongest binding affinities, with free binding energies (ΔG) of -5.87 and -5.84 kcal/mol, respectively. The docking method was validated with an RMSD value of 0.56 Å, confirming the accuracy of the protocol. ADME and toxicity predictions using pkCSM indicated favorable pharmacokinetic properties and low toxicity risks. Molecular dynamics simulations supported the stability of the ligand-receptor complexes. This study concludes that polyphenolic compounds from tea exhibit potential as alpha-glucosidase inhibitors and may be developed as supportive therapeutic agents for T2DM through computational methods.

Keywords: Type 2 Diabetes Mellitus, *Camellia sinensis*, Polyphenols, Molecular Docking, In Silico