

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF YANG TERKANDUNG DALAM ASAM JAWA
(*Tamarindus indica L.*) SEBAGAI KANDIDAT ANTIDIABETES**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana farmasi



TAZKIA AMELIA HARTOYO

31121146

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
AGUSTUS 2025**

ABSTRACT

Type 2 diabetes mellitus is a chronic metabolic disorder characterized by hyperglycemia due to insulin resistance and impaired insulin secretion. Long-term use of synthetic drugs often leads to side effects, thereby driving the need for alternative treatments derived from natural sources. Tamarind leaves (*Tamarindus indica* L.) are known to contain active compounds such as flavonoids and polyphenols with potential antidiabetic properties. This study aims to evaluate the antidiabetic activity of active compounds in tamarind leaves through an *in silico* approach, including molecular docking and molecular dynamics (MD) simulations targeting the alpha-glucosidase receptor (PDB ID: 3TOP). Docking results showed that isovitexin, orientin, and vitexin exhibited the strongest binding affinities of -7.30, -7.09, and -7.29 kcal/mol, respectively. Interaction analysis revealed stable hydrogen and hydrophobic bonds with the receptor's active residues. Drug-likeness screening using Lipinski's rule and pharmacokinetic (ADMET) profiling supported their potential as oral drug candidates. MD simulation over 50 ns indicated that the isovitexin-3TOP complex maintained RMSD values below 2.5 Å and low RMSF, suggesting a stable complex under physiological conditions. These findings indicate that isovitexin, orientin, and vitexin from *Tamarindus indica* L. leaves are promising candidates for the development of antidiabetic agents targeting type 2 diabetes mellitus.

Keywords: *Tamarindus indica* L., antidiabetic, *in silico*, molecular docking, molecular dynamics simulation, isovitexin, orientin, vitexin.

ABSTRAK

Diabetes melitus tipe 2 merupakan penyakit metabolik kronis yang ditandai dengan hiperglikemia akibat resistensi insulin dan disfungsi sekresi insulin. Penggunaan obat sintesis jangka panjang dapat menimbulkan efek samping, sehingga dibutuhkan alternatif pengobatan dari bahan alam. Daun asam jawa (*Tamarindus indica* L.) diketahui mengandung senyawa aktif flavonoid dan polifenol yang berpotensi sebagai antidiabetes. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi aktivitas antidiabetes dari senyawa aktif daun asam jawa secara *in silico* melalui pendekatan *molecular docking* dan *molecular dynamics simulation* terhadap reseptor alpha-glucosidase (kode PDB: 3TOP). Hasil docking menunjukkan bahwa senyawa isovitexin, orientin, dan vitexin memiliki afinitas pengikatan paling kuat, dengan nilai energi ikat masing-masing sebesar -7,30; -7,09; dan -7,29 kkal/mol. Analisis interaksi menunjukkan ikatan hidrogen dan hidrofobik yang stabil dengan residu aktif reseptor. Evaluasi *drug-likeness* menggunakan aturan Lipinski dan prediksi farmakokinetik ADMET mendukung potensi senyawa sebagai kandidat obat oral. Simulasi dinamika molekuler selama 50 ns menunjukkan bahwa kompleks isovitexin-3TOP memiliki nilai RMSD yang relatif stabil (<2,5 Å) dan fluktuasi residu (RMSF) yang rendah, mengindikasikan kestabilan kompleks dalam kondisi fisiologis. Berdasarkan hasil tersebut, senyawa isovitexin, orientin, dan vitexin dari daun *Tamarindus indica* L. berpotensi dikembangkan sebagai kandidat antidiabetes tipe 2.

Kata kunci: *Tamarindus indica* L., antidiabetes, *in silico*, *molecular docking*, simulasi dinamika molekuler, isovitexin, orientin, vitexin.