

**STUDI IN SILICO SENYAWA METABOLIT SEKUNDER DALAM
HERBA KUMIS KUCING (*Orthosiphon stamineus* B.)DALAM
MENGHAMBAT ENZIM α -GLUKOSIDASE**

SKRIPSI



SALMA SAMROTUL WIDAD

31121077

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2026**

**STUDI IN SILICO SENYAWA METABOLIT SEKUNDER DALAM
HERBA KUMIS KUCING (*Orthosiphon stamineus* B.)DALAM
MENGHAMBAT ENZIM α -GLUKOSIDASE**

SKRIPSI

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



SALMA SAMROTUL WIDAD

31121077

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2026**

ABSTRAK

STUDI IN SILICO SENYAWA METABOLIT SEKUNDER DALAM HERBA KUMIS KUCING (*Orthosiphon stamineus B.*)DALAM MENGHAMBAT ENZIM α - GLUKOSIDASE

Salma Samrotul Widad

Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada, Tasikmalaya

Abstrak

Diabetes mellitus (DM) tipe 2 ialah gangguan metabolik kronis dengan angka kejadian yang terus bertambah di seluruh dunia. Salah satu strategi terapi adalah menghambat kerja enzim α -glukosidase guna mengendalikan kadar glukosa darah. Penelitian ini bertujuan guna mengidentifikasi potensi inhibitor α -glukosidase dari senyawa-metabolit sekunder yang ada dalam herba kumis kucing (*orthosiphon stamineus B*) 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 ladanein (–5,94 kkal/mol), 5,4'-Dihydroxy-6,7-dimethoxyflavone (–5,91 kkal/mol), 6-Hydroxyluteolin 5,6,7,4'-tetramethyl ether (–5,58 kkal/mol), 5-Hydroxy-7,3',4'-trimethoxyflavone (–5,45 kkal/mol), dan rhamnazin (–5,45 kkal/mol) memiliki afinitas ikatan lebih kuat dibandingkan dengan obat pembanding acarbose (–5,24 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 metabolit sekunder herba kumis kucing memiliki kemampuan sebagai kandidat obat antidiabetes berbasis inhibitor α -glukosidase.

Kata kunci: α -glukosidase, herba kumis kucing, molecular docking, diabetes, in silico, orthosiphon stamineus b

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 secondary metabolites *orthosiphon stamineus B* 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 ladanein (–5,94 kkal/mol), 5,4'-Dihydroxy-6,7-dimethoxyflavone (–5,91 kkal/mol), 6-Hydroxyluteolin 5,6,7,4'-tetramethyl ether (–5,58 kkal/mol), 5-Hydroxy-7,3',4'-trimethoxyflavone (–5,45 kkal/mol), dan rhamnazin (–5,45 kkal/mol) have a stronger binding affinity compared to the reference drug acarbose (–5.24 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, *Orthosiphon Stamineus B*, molecular docking, in silico, diabetes, drug discovery