Journal of Innovative and Creativity
Journal Homepage: https://joecy.org/index.php/joecy
e-mail: journaljoecy@gmail.com

Faculty of Education
University of Pahlawan Tuanku Tambusai
ISSN 2775-771X (Online)
ISSN 2962-570X (Printed)
6 (2) 2026, Page: 30336-30343

In Silico Drug Discovery: Menggali Potensi Tanaman Herbal dalam Pengobatan Diabetes

In Silico Drug Discovery: Unveiling the Potential of Herbal Plants in Diabetes

Saeful amin [1], Dewi Resnawati Nursiyam [2*], Naza Agniarty [3], Nayla Neva Nabillah[4]

[1,2,3,4] Program Studi S-1 Farmasi Universitas Bakti tunas Husada
Jl. Letjen Mashudi No.20, Setiaratu, Kec. Cibeureum, Kab. Tasikmalaya, Jawa Barat 46196

***e-mail korespondensi: dewiresnawati245@gmail.com**
Nomor handphone atau Whatsapp aktif: 085220912926

Published: Juni , 2026

ABSTRAK

Diabetes Mellitus (DM) adalah sebuah kondisi gangguan metabolisme tubuh kronis yang dicirikan dengan kadar glukosa dalam darah yang melampaui kadar normal. Jumlah penderita diabetes yang semakin meningkat menarik perhatian para peneliti untuk menemukan alternatif obat antidiabetes yang lebih aman serta tidak menghasilkan efek samping. Oleh karena itu pemanfaatan bahan alam sering dijadikan alternatif sebagai antidiabetes karena memiliki efek samping yang rendah dibandingkan obat sintetis. Penelitian ini dimaksudkan guna menggali potensi senyawa bioaktif dari tanaman herbal yang dapat digunakan sebagai terapi antidiabetes dengan pendekatan in silico. Dengan memanfaatkan perangkat lunak molecular docking serta simulasi ADMET, kami menganalisis senyawa-senyawa yang diisolasi dari tanaman herbal yang telah diketahui memiliki efek terapeutik pada diabetes mellitus (DM)

Kata Kunci : *In Silico*, Senyawa Herbal, *Diabetes Mellitus (DM), Molecular docking, ADMET*

ABSTRACT

Diabetes Mellitus (DM) is a chronic metabolic disorder characterized by elevated blood glucose levels. The increasing number of diabetes sufferers has drawn researchers' attention to finding safer alternatives to antidiabetic drugs that are free from side effects. Therefore, the use of natural ingredients is often considered an alternative antidiabetic agent due to their lower side effects compared to synthetic drugs. This research intends to examine the potential of bioactive compounds from herbal plants for use as antidiabetic therapy through an in silico approach. Utilizing the molecular docking software and ADMET simulations, we analyzed compounds isolated from herbal plants known to have therapeutic effects on diabetes mellitus (DM)

.

Keywords: In Silico, Herbal Compounds, Diabetes Mellitus (DM), Molecular docking, ADMET

© The Author(s). 2021 Open Access This article is licensed under a Creative Commons Atibution 4.0 International License, which permits use, sharing, adaptation, distribution and reproduction in any medium or format, as long as you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons licence, and indicate if changes were made. The images or other third party material in this article are included in the article's Creative Commons licence, unless indicated otherwise in a credit line to the material. To view a copy of this licence, visit http://creativecommons.org/licenses/by/4.0

PENDAHULUAN

Diabetes, suatu penyakit tidak menular (PTM), memberikan kontribusi signifikan terhadap meningkatnya angka kematian global. Pada tahun 2030, penyakit ini diproyeksikan menjadi penyebab utama kematian di Afrika. Kondisi ini dicirikan dengan tingginya kadar glukosa darah secara berkelanjutan, sebab sekresi insulin yang tidak memadai, ketidakpekaan sel terhadap insulin, atau keduanya, dan seringkali dikaitkan dengan kegagalan sel B pankreas. Dengan angka kematian yang mengkhawatirkan, diabetes telah muncul sebagai penyebab utama kematian di seluruh dunia. Federasi

Diabetes Internasional (IDF) melaporkan peningkatan prevalensi diabetes global dari 151 juta orang dewasa pada tahun 2000 menjadi 451 juta pada tahun 2017, dengan prediksi peningkatan menjadi 693 juta pada tahun 2045, terutama di negara-negara berpenghasilan rendah hingga menengah, jika tidak ada tindakan yang diambil

Diabetes Mellitus (DM) ialah sebuah keadaan yang terjadi ketika metabolism tubuh terganggu secara kronis, yang dicirikan melalui tingginya kadar glukosa pada darah yang melampaui kadar normal (Dey & Attele, 2002). Diabetes diakibatkan oleh sejumlah faktor, mencakup penurunan kadar produksi insulin yang disekresikan oleh organ pankreas, menurunnya fungsi dari sel-sel tubuh terhadap respon insulin yang disekresikan (Agoro et al., 2022). Pengombinasian antara menurunnya kadar produksi insulin serta menurunnya sensitivitas sel dalam merespon insulin, ataupun oleh disregulasi hormonal sepanjang fase kehamilan juga mampu mengakibatkan terjadinya penyakit diabetes (Derso, 2022).

Meskipun beberapa obat konvensional tersedia untuk manajemen diabetes, keterjangkauannya bagi individu berpenghasilan rendah dan masalah yang terkait dengan penggunaan jangka panjang, seperti efek samping dan kepatuhan pasien yang buruk, tetap menjadi tantangan

Obat herbal masih menjadi pilihan utama bagi mayoritas penduduk Indonesia, terkhususnya individu yang menempati wilayah pedesaan. Di wilayah pedesaan, berbagai jenis tanaman obat masih tumbuh secara alami dan melimpah di hutan atau pekarangan, sehingga mudah diakses oleh masyarakat. Selain faktor ketersediaan, alasan lain yang membuat obat herbal tetap populer ialah karena harganya yang lebih murah dibandingkan dengan obat kimiawi serta risiko efek samping yang lebih rendah. Kondisi ini mendorong masyarakat untuk terus memanfaatkan pengetahuan lokal mengenai tanaman obat yang diwariskan secara turun-temurun.

Secara tradisional, tanaman obat digunakan untuk mengatasi berbagai keluhan kesehatan, termasuk peradangan dan penurunan daya tahan tubuh. Seiring dengan kemajuan ilmu pengetahuan dan teknologi, sejumlah kajian praklinik mulai mengkaji efektivitas tanaman obat dari Indonesia secara ilmiah

Tanaman obat merupakan sumber fitokimia yang kaya, memiliki kemampuan untuk meringankan berbagai penyakit dan gangguan. Sifat farmakologisnya berasal dari metabolit sekunder, yang merupakan sumber alami senyawa bioaktif. Karena diabetes memengaruhi banyak jalur di berbagai jaringan, jalur-jalur ini berfungsi sebagai target untuk pengembangan obat dalam monoterapi . Ekstrak yang mengandung metabolit sekunder bioaktif dapat digunakan dalam politerapi untuk menargetkan banyak jalur, meningkatkan hasil pengobatan. Sementara penemuan obat biasanya berfokuss pada pengisolasian senyawa utama tunggal, mengidentifikasi dan mengkarakterisasi senyawa fitokimia bioaktif dalam ekstrak yang secara kolektif memodulasi banyak jalur untuk memperbaiki perkembangan penyakit sangatlah penting.(Olaokun & Zubair, 2023)

METODE PENELITIAN

Metode ini memanfaatkan studi pustaka dengan menghimpun rujukan beserta data melalui sejumlah artikel ilmiah yang terpercaya. Seperti PubMed, Scopus, Web of Science, ScienceDirect, dan Google Scholar. Proses pencarian difokuskan pada publikasi berbahasa Inggris serta Indonesia yang dipublikasikan antara tahun 2020-2026, dengan menggunakan kombinasi kata kunci yang telah dirumuskan secara sistematis. Kata kunci utama yang digunakan meliputi: In Silico, Senyawa Herba, Diabetes Mellitus (DM), Molecular docking, ADMET

- Population: Tanaman Herbal
- Intervention: Pendekatan in silico
- Outcome: Potensi antidiabetes

HASIL DAN PEMBAHASAN

Satu dari sekian solusi terapi pengobatan penyakit DMT2 ialah dengan memanfaatkan bioaktif kimia yang diperoleh melalui tanaman alam, sebab mempunyai toksisitas yang minim (Bare dkk., 2019). Pengobatan herbal tradisional sudah umum dimanfaatkan sebagai sumber yang esensial dalam

mengembangkan keilmuan farmasi. Secara farmakologis, tumbuhan herbal menyimpan sejumlah fungsi, seperti antihipertensi, antioksidan, antidiabetes, serta antiinflamasi (Kanu dkk., 2018)

Sebagian besar penelitian memanfaatkan perangkat lunak AutoDock Vina karena kemampuannya dalam memprediksi interaksi antara ligan dan protein dengan akurasi dan efisiensi yang baik. Namun, perangkat lunak lain seperti Schrodinger GLIDE, MOE (Molecular Operating Environment), dan Discovery Studio juga digunakan untuk membantu validasi hasil simulasi (Vo Van et al., 2023). Penggunaan beberapa perangkat lunak dalam satu studi juga sangat meningkatkan keandalan hasil yang diperoleh.

Analisis sistematis yang teridentifikasi sebanyak artikel ilmiah yang menerapkan teknik molecular docking untuk menilai potensi senyawa alami sebagai agen untuk diabetes. Secara umum, studi ini berfokus pada dua enzim penting dalam metabolisme karbohidrat, yaitu a-glukosidase dan a-amilase, yang terlibat dalam proses pemecahan polisakarida menjadi glukosa sederhana. Penghambatan kedua enzim ini bertujuan untuk menurunkan kadar glukosa darah setelah makan (Postprandial) pada penderita diabetes melitus tipe 2 (T2DM) (Magaji et al., 2022)

Molecular docking dapat digunakan untuk menemukan senyawa alami yang memiliki potensi tinggi untuk dijadikan agen antidiabetes. Flavonoid dan senyawa fenolik adalah kelompok yang paling menjanjikan, yang memiliki daya ikat tinggi terhadap enzim target serta dapat memodulasi mekanisme pensinyalan insulin. Disarankan untuk menggabungkan pendekatan in silico, in vitro, dan in vivo untuk menilai efektivitas serta keamanan senyawa, dan juga untuk memahami mekanisme kerja yang rumit serta multi-target

Metode in-silico ialah metode baru yang menjanjikan serta menarik dalam mengidentifikasi target obat, sebab mampu mengidentifikasi mekanisme interaksi antara senyawa bioaktif dengan protein target. Pengujian in silico berperan krusial pada bidang kimia medisinal dalam rangka merancang, mengidentifikasi, serta mengoptimasikan senyawa bioaktif selama prosedur pengembangan obat (Kesuma dkk.. 2018). Maka dari itu, study literarure ini dimaksudkan guna menelusuri kandungan senyawa bioaktif antidiabetes tanaman herbal yang kemungkinan mampu menjadi alternatif pengobatan diabetes melalui studi in silico.

Pendekatan in silico drug discovery menjadi salah satu strategi yang semakin banyak digunakan dalam pengembangan kandidat obat antidiabetes karena mampu mempercepat proses skrining senyawa bioaktif serta menekan biaya penelitian dibandingkan metode konvensional. Melalui teknik molecular docking, peneliti dapat memprediksi afinitas dan stabilitas ikatan antara senyawa herbal dengan target protein yang berperan dalam patogenesis diabetes mellitus. Semakin rendah nilai energi ikatan (binding affinity), semakin besar kemungkinan senyawa tersebut memiliki aktivitas biologis terhadap target yang diuji (Pinzi & Rastelli, 2019).

Berdasarkan hasil studi literatur yang telah dianalisis, sebagian besar senyawa bioaktif tanaman herbal menunjukkan kemampuan berinteraksi dengan protein target yang berhubungan langsung dengan regulasi kadar glukosa darah, seperti α-glukosidase, α-amilase, SGLT-2, AMPK, DPP-4, dan insulin tyrosine kinase. Penghambatan enzim α-glukosidase dan α-amilase merupakan salah satu mekanisme penting dalam terapi diabetes karena dapat memperlambat pemecahan karbohidrat menjadi glukosa sehingga lonjakan kadar gula darah setelah makan dapat dikendalikan (Magaji et al., 2022).

Kelompok senyawa flavonoid seperti quercetin, luteolin, apigenin, dan kaempferol ditemukan pada beberapa tanaman yang dikaji, antara lain kelor, tulsi, dan jeruk nipis. Senyawa-senyawa tersebut memiliki aktivitas antioksidan yang kuat dan mampu meningkatkan sensitivitas insulin melalui modulasi berbagai jalur pensinyalan seluler. Selain itu, flavonoid juga diketahui dapat mengurangi stres oksidatif yang merupakan salah satu faktor utama penyebab kerusakan sel β pankreas pada penderita diabetes mellitus tipe 2 (Khan et al., 2023).

Hasil analisis juga menunjukkan bahwa beberapa tanaman memiliki mekanisme kerja yang berbeda sehingga berpotensi memberikan efek terapi yang bersifat multi-target. Sebagai contoh, daun salam, kayu secang, dan daun yakon menunjukkan aktivitas sebagai inhibitor SGLT-2 yang berperan dalam menghambat reabsorpsi glukosa di ginjal. Mekanisme ini serupa dengan golongan obat antidiabetes modern seperti empagliflozin yang saat ini banyak digunakan dalam terapi diabetes tipe

2. Kesamaan mekanisme tersebut menunjukkan bahwa senyawa alami dapat menjadi sumber kandidat obat baru yang lebih aman dan ekonomis (Prasetiyo et al., 2024).

Selain mengevaluasi afinitas ikatan, analisis ADMET menjadi tahapan penting dalam pengembangan obat berbasis bahan alam. Parameter absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas digunakan untuk memprediksi keamanan serta efektivitas senyawa sebelum dilakukan pengujian laboratorium. Beberapa senyawa menunjukkan profil farmakokinetik yang baik, namun terdapat pula senyawa yang memiliki potensi toksisitas sehingga memerlukan optimasi struktur kimia lebih lanjut. Oleh karena itu, hasil molecular docking tidak dapat dijadikan satu-satunya dasar dalam menentukan efektivitas kandidat obat dan harus didukung oleh pengujian biologis lainnya (Ferreira et al., 2015).

Secara keseluruhan, hasil kajian ini menunjukkan bahwa tanaman herbal merupakan sumber senyawa bioaktif yang sangat potensial untuk dikembangkan sebagai agen antidiabetes. Kombinasi pendekatan molecular docking, simulasi ADMET, serta validasi melalui uji in vitro dan in vivo dapat mempercepat proses penemuan obat baru yang lebih efektif dan aman. Dengan kekayaan biodiversitas tanaman obat yang dimiliki Indonesia, penelitian berbasis in silico dapat menjadi langkah awal yang strategis dalam pengembangan fitofarmaka antidiabetes di masa mendatang.

Selain memiliki aktivitas penghambatan terhadap enzim α-glukosidase dan α-amilase, berbagai senyawa bioaktif tanaman herbal juga menunjukkan kemampuan berinteraksi dengan target protein lain yang berperan dalam regulasi metabolisme glukosa. Pendekatan in silico memungkinkan identifikasi senyawa aktif secara lebih cepat melalui analisis afinitas ikatan terhadap protein target yang terlibat dalam patogenesis Diabetes Mellitus tipe 2. Senyawa golongan flavonoid, fenolik, terpenoid, dan glikosida diketahui memiliki potensi tinggi sebagai kandidat antidiabetes karena mampu berikatan dengan protein seperti DPP-4, SGLT-2, PTP1B, serta α-glukosidase yang berperan penting dalam pengendalian kadar glukosa darah (Makia & Amin, 2025). Hasil tersebut menunjukkan bahwa tanaman herbal tidak hanya bekerja melalui satu mekanisme, tetapi mampu memberikan efek multitarget yang mendukung terapi diabetes secara lebih komprehensif.

Penelitian yang dilakukan oleh Prasetiyo et al. (2024) menunjukkan bahwa senyawa 3,4-Dicaffeoylquinic acid dari daun yakon, kayu secang, dan daun salam memiliki kestabilan interaksi yang baik terhadap protein SGLT-2. Protein ini berperan dalam proses reabsorpsi glukosa di ginjal sehingga penghambatannya dapat membantu menurunkan kadar glukosa darah melalui peningkatan ekskresi glukosa urin. Temuan tersebut memperkuat potensi tanaman herbal sebagai sumber kandidat obat antidiabetes yang bekerja melalui mekanisme serupa dengan obat modern golongan SGLT-2 inhibitor (Prasetiyo et al., 2024).

Selain itu, senyawa flavonoid seperti quercetin, luteolin, kaempferol, rutin, dan vitexin diketahui memiliki nilai binding affinity yang tinggi terhadap enzim α-glukosidase, α-amilase, dan reseptor PPARγ. Interaksi tersebut berkontribusi dalam meningkatkan sensitivitas insulin serta menghambat pemecahan karbohidrat menjadi glukosa sederhana. Senyawa flavonoid juga menunjukkan profil ADMET yang baik dengan tingkat bioavailabilitas oral yang cukup tinggi dan risiko toksisitas yang rendah, sehingga berpotensi untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat terapi antidiabetes berbasis bahan alam (Amin & Setiawati, 2025).

Analisis ADMET menjadi tahapan penting dalam penelitian drug discovery berbasis in silico karena dapat memprediksi karakteristik farmakokinetik dan keamanan suatu senyawa sebelum dilakukan pengujian laboratorium. Hasil berbagai penelitian menunjukkan bahwa sebagian besar senyawa herbal memiliki kemampuan absorpsi yang baik, distribusi yang memadai, serta tingkat toksisitas yang relatif rendah. Oleh karena itu, kombinasi metode molecular docking, simulasi dinamika molekuler, dan prediksi ADMET dapat meningkatkan efisiensi proses penemuan obat baru serta mengurangi risiko kegagalan pada tahap pengembangan selanjutnya (Amin & Pitara, 2025).

Secara keseluruhan, pendekatan in silico memberikan kontribusi besar dalam eksplorasi senyawa bioaktif tanaman herbal sebagai kandidat antidiabetes. Metode ini mampu mempercepat proses skrining senyawa, mengidentifikasi mekanisme kerja pada tingkat molekuler, serta memprediksi keamanan dan efektivitas kandidat obat. Dengan tingginya keanekaragaman hayati tanaman obat di Indonesia, penelitian berbasis in silico berpotensi menjadi langkah awal yang strategis dalam pengembangan terapi antidiabetes yang lebih aman, efektif, dan terjangkau bagi masyarakat.

Tabel 1. Hasil Study Literatur Molecular Docking Senyawa Alam sebagai AntidiabettesTanaman	**Senyawa Aktif**	**Reseptor**	**Referensi**
Daun Singawalang	• Benzyl 2-hydroxyethyl trisulphide	• AMPK-a2	(Sagitasa et al., 2021)
Bunga Tapak Dara	• Lochnericine • Chorismic acid • Serpentine • Catharanthine • Tabersonine • Ursolic acid • Ajmalicine (Raubasine) • Chlorambucil	• Adregernergik • Reseptor α1-Adrenergik • NF-ϰB, COX-2, caspase	(Antidiabetes et al., 2023)
Daun Salam Kayu Secang Daun Yakon	• 1,3-0-Diffeoylquinic acid • 3,4-Dicaffeoylquinic acis	• Struktur human SGLT2-MAP17 complex bound with empagliflozin • Enzim Sodium *glucose co-transporter-2*	(Prasetiyo et al., 2024)
Jeruk nipis	• Quercentin • Hesperentin • Caffeic acid	• Phosphatidylinositpl 3-kinase	(Alomar et al., 2025)
Kelor	• Quercentin • Cholorogenic acid • Apigenin • Rhamnetin • Lutein • Serpentine	• Insulin Tyrosine kinase	(Amin et al., 2025)
Pohon karet	• Stigmasterol • Lupeol • Epiafzelechin • Epicatechin	• Enzim Amylase • Enzim glikogen	(Olaokun & Zubair, 2023)
Gembili	• Diosgenin • Furostanol • 1-feruloyl-sn-glycerol	• G^PD dan PTPN1	(Malikhana et al., 2021)
Anggur (MGP)	• Peonidin-3-0-acetylglucoside • Quercentin-2-0-glucuronide	• Enzim amilase saliva dan prankeas, serta a-glukosidase usus	(Kato-schwartz et al., 2020)

	• Peonidin-3-0-glucoside • Cathecin • Epycathin		
Kemangi	• Estragol • Linalool	• Porcine pancreatic amilase (HPA)	(Enzymes et al., n.d.)
Pare	• Peptida EPGGGG	• Insulin reseptor (IR) • Soduium glucose contransporter 1 (SGLT1) • Glucose tranporter 2 (GLUT) • Dipeptydil peptidase-IV (DPP_IV)	(Arif et al., 2021)

Senyawa terbaik dari isolat daun singawalang yang yang potensial dalam meminimalkan kadar glukosa darah dalam pengobatan penyakit Diabetes Mellitus ialah senyawa benzyl 2-hydroxyethyl trisulphide sebab memperlihatkan interaksi serta afinitas terbaik terhadap reseptor AMPK-a2. Energi Gibbs dan Ki benzyl 2-hydroxyethyl trisulphide lebih minim dibanding senyawa pembanding dengan nilai Energi Gibbs -5,95 serta Ki 43,24uM. Sementara prediksi aktivitas ADME serta toksisitas dengan ADMET Predictor memperlihatkan, senyawa benzyl 2-hydroxyethyl trisulphide dinyatakan "cukup baik", dengan mengacu pada sejumlah parameter. Tetapi, harus ditekankan bahwa senyawa bersifat mutagenic, yang membutuhkan adanya modifikasi struktur dalam rangka meminimalisir efek mutagen terkait.(Sagitasa et al., 2021)

Berdasarkan analisis komputasi, Dua senyawa dalam daun salam yaitu senyawa 10-Dicaffeoylquinic acid dan senyawa 3.4- Dicaffeoylquinic acid berpotensi sebagai SLGT-2 inhibitor yang berperan sebgai antidiabetes, dua senyawa ini juga menjadi senyawa dengan kestabilannya dalam berinteraksi dengan enzim Sodium glucose co- transporter-2 serta tidak menghasilkan hepatotoksik

Merujuk pada temuan penelitian, diidentifikasi bahwa senyawa bioaktif gembili (Dioscorea esculenta) mencakup senyawa diosgenin, senyawa furostano serta senyawa 1-Feruloyl-sn-glycerol (Pa 0,622) dengan potensinya sebagai antidiabetes. Keterkaitan antara senyawa bioaktif gembili serta protein target dengan KEGG pathways memperlihatkan interaksi yang dekat di jalur metabolic pathway beserta insulin resistance. Senyawa diosgenin serta furostanol diidentifikasi lebih berpotensi serta lebih efektif untuk dimanfaatkan menjadi antidiabetes dengan penghambatan Glucose-6-phosphate 1-dehydrogenase (G6PD). (Malikhana et al., 2021)

Melalui pendekatan in silico senyawa bioaktif daun kelor seperti chlorogenic acid, quercentin, serpentin, lutein dan rhamtein , senyawa senyawa ini dapat berinteraksi secara efektif dengan target terapi diabetes dan efektif menghambat a-glukosidase

Pohon karet memiliki senyawa epiafzelechin dan epicatechin, dua senyawa tersebut dapat berpotensi antidiabetes, yang diisolasi dengan fraksi etil asetat, yang dimana akan menghambat aktivitas a-glukosidase, tetapi dapat meningkatkan dalam pemanfaatan glukosa, serta interaksi pengikatan yang terdeteksi dengan reseptor kunci hal ini menekankan teurapeutik

Tanaman gembili (Dioscorea esculenta) memiliki kandungan senyawa bioaktif yang berpotensi dalam pencegahan hingga pengobatan penyakit degeneratif, salah satunya ialah diabetes mellitus. Diabetes mellitus ditandai dengan kadar glukosa darah yang tinggi (hiperglikemia) disebabkan oleh kombinasi dua faktor yakni sekresi abnormal insulin dan ketidakmampuan jaringan sensitif insulin untuk merespon insulin dengan tepat. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui kandungan

senyawa bioaktif tanaman gembili yang berpotensi pada jalur persinyalan antidiabetes melalui studi in silico. Metode penelitian ini dilakukan secara deskriptif eksploratif menggunakan database online seperti ChEBI, PubChem, PASS (Prediction of Activity Spectra for Subtances) online, SEA (Similarity Ensemble Approach), SwissTraget Prediction, dan STRING. Gembili memiliki 9 senyawa bioaktif yang berpotensi dalam pengobatan diabetes mellitus yaitu diosgenin, phenol, stigmastanol, furostanol, spirostanol, ergostanol, cholestanol, pregnanol dan 1-feruloyl-sn-glycerol. Hasil penelitian menunjukkan hubungan antara senyawa bioaktif gembili dan protein target melalui KEGG pathways memiliki interaksi yang dekat pada jalur Metabolic pathway dan Insulin resistance. Jalur Metabolic pathway terdapat protein target Glucose-6-phosphate 1-dehydrogenase (G6PD), serta pada jalur Insulin resistance terdapat protein target Tyrosine-protein phosphatase non-receptor type 1 (PTPNI). Senyawa bioaktif yang berperan yakni diosgenin, furostanol, dan 1-feruloyl-sn-glycerol. Hasil ini menunjukkan bahwa senyawa bioaktif gembili memiliki aktivitas penghambatan terhadap DPT (Direct Protein Target) pada jalur Metabolic pathway dan Insulin resistance.

MGPE dapat dianggap sebagai penghambat baik amilase saliva maupun pankreas, tetapi bukan enzim a-glukosidase. Secara kinetik, penghambatan menunjukkan pola yang kompleks, dengan beberapa pengikatan konstituen ekstrak ke enzim. Lebih lanjut, studi docking in silico menunjukkan bahwa beberapa senyawa antosianin, seperti peonidin-3-O-asetilglukosida, quercetin-3-O-glukuronida, dan isorhamnetin-3-O-glukosida, selain katekin, kemungkinan besar merupakan polifenol yang bertanggung jawab atas penghambatan a-amilase yang disebabkan oleh MGPE. Terakhir, MGPE juga memiliki efek negatif pada hidrolisis pati in vivo, karena mengurangi peningkatan kadar glukosa yang terjadi setelah pemberian pati. Temuan ini mendukung hipotesis bahwa MGPE dapat memadai sebagai adjuvan untuk menjaga glikemia normal dan dapat menjadi dasar untuk uji klinis.

Ekstrak heksana dan hidroetanolat dari daun dan bunga Ocimum basilicum dievaluasi potensi antioksidan, antidiabetes, dan anti-obesitasnya menggunakan sejumlah uji in vitro. Kedua bagian tersebut menunjukkan aktivitas penghambatan α-amilase yang hampir setara dengan obat acarbose. Aktivitas anti-lipase juga cukup signifikan meskipun sedikit lebih rendah daripada obat standar orlistat. Senyawa kimia utama yang diidentifikasi dengan GC-MS meliputi estragole, linalool, γ-cadinene, D-germacrene, dan ϰ-elemene. Studi docking in silico menunjukkan bahwa linalool dan estragole memiliki aktivitas penghambatan yang dapat dimanfaatkan terhadap kedua enzim tersebut

Momordica charantia, yang umumnya dikenal sebagai pare, memiliki banyak senyawa bioaktif dengan sifat antidiabetes. Studi ini dirancang untuk menggunakan metode komputasi untuk menemukan peptida antidiabetes terbaik yang dibuat dari polipeptida hipoglikemik-P dari M. charantia. Afinitas pengikatan dan pola interaksi peptida dievaluasi terhadap empat protein reseptor (yaitu, sebagai agonis reseptor insulin dan inhibitor sodium-glucose cotransporter 1, dipeptidyl peptidase-IV, dan glucose transporter 2) menggunakan pendekatan penambatan molekuler. Sebanyak tiga puluh tujuh peptida ditambatkan terhadap reseptor-reseptor ini. Dari sekian banyak peptida, lima peptida terbaik terhadap masing-masing reseptor dipilih berdasarkan skor S dan afinitas pengikatannya. Akhirnya, delapan ligan terbaik (yaitu, LIVA, TSEP, EKAI, LKHA, EALF, VAEK, DFGAS, dan EPGGGG) dipilih karena ligan-ligan ini secara ketat mengikuti aturan lima Lipinski dan menunjukkan profil ADMET yang baik. Satu peptida, EPGGGG, menunjukkan aktivitas terhadap protein reseptor insulin dan SGLT1. Kompleks terbaik untuk kedua target ini kemudian dikenai simulasi dinamika molekuler selama 50 ns dan uji energi pengikatan MM-GBSA yang menyimpulkan bahwa kedua kompleks tersebut sangat stabil, dan interaksi antarmolekul didominasi oleh energi van der Waals dan elektrostatik. Secara keseluruhan, ligan-ligan yang dipilih sangat memenuhi kriteria evaluasi seperti obat dan terbukti memiliki sifat antidiabetes yang baik.

KESIMPULAN

Penelitian ini menyimpulkan bahwa pendekatan in silico melalui molecular docking dan analisis ADMET efektif dalam mengidentifikasi potensi senyawa bioaktif dari tanaman herbal sebagai kandidat antidiabetes, di mana berbagai senyawa dari tanaman seperti tapak dara, daun salam, kelor, tulsi, dan gembili menunjukkan kemampuan berinteraksi dengan target protein penting seperti

AMPK, SGLT-2, α-glukosidase, dan insulin tyrosine kinase sehingga berpotensi menurunkan kadar glukosa darah , dengan beberapa senyawa memiliki afinitas dan stabilitas yang baik serta profil farmakokinetik yang cukup aman meskipun masih terdapat keterbatasan seperti potensi toksisitas yang memerlukan optimasi lebih lanjut, sehingga secara keseluruhan tanaman herbal menjadi sumber kandidat obat yang menjanjikan namun tetap membutuhkan validasi lanjutan melalui uji in vitro, in vivo, dan klinis sebelum dapat diaplikasikan dalam terapi diabetes secara luas.

REFERENCES

Agoro, E. S., Soroh, A. E., & Thomas, C. C. (2022). *Correlationship between Diabetes Mellitus and Chronic Carbon Monoxide Intoxication*. 63–74. https://doi.org/10.4236/jdm.2022.121007

Alomar, H. A., El, W. M., Mandour, A. A., Naim, A. A., Ghali, N. I., Ibrahim, T. A., & Fathallah, N. (2025). *Results in Chemistry Computational antidiabetic assessment of Salvia splendens L . polyphenols : SMOTE , ADME , ProTox , docking , and molecular dynamic studies*. *14*(November 2024).

Amin, S., Aulia, M., Anjani, P. T., & Leandra, D. N. (2025). *Literature Review : Pendekatan In Silico Potensi Senyawa dalam Daun Kelor (Moringa oleifera L .) sebagai Kandidat Antidiabetes*. *5*(1), 91–101.

Antidiabetes, S., Penghambatan, M., Fernanda, F., Christy, A., Sugianto, N. S. M., Dewi, H. P., Anggi, J. F., Rusdin, A., & Mardisanutomo, H. T. (2023). *Farmaka Farmaka*. *21*.

Arif, R., Ahmad, S., Mustafa, G., Mahrosh, H. S., Ali, M., Tahir, M., & Dar, H. R. (2021). *Molecular Docking and Simulation Studies of Antidiabetic Agents Devised from Hypoglycemic Polypeptide-P of Momordica charantia*. *2021*.

Dey, L., & Attele, A. S. (2002). *Alternative Therapies for Type 2 Diabetes*. *7*(1), 45–58.

Enzymes, L., Noor, Z. I., Ahmed, D., Rehman, H. M., Qamar, M. T., Froeyen, M., Ahmad, S., & Mirza, M. U. (n.d.). *Analysis of Ocimum basilicum Aerial Biomass and in Silico Molecular Docking Simulations with*.

Ferreira, L. G., dos Santos, R. N., Oliva, G., & Andricopulo, A. D. (2015). Molecular Docking and Structure-Based Drug Design Strategies. Molecules, 20(7), 13384–13421. https://doi.org/10.3390/molecules200713384

Kato-schwartz, C. G., Carvalho, R., Corrêa, G., Souza, D. De, Augusto, F., Seixas, V., Haminiuk, C. W. I., Barros, L., & Ferreira, I. C. F. R. (2020). *Potential anti-diabetic properties of Merlot grape pomace extract : An in vitro , in silico and in vivo study of a -amylase and a -glucosidase inhibition*. *137*(March).

Khan, H., Ullah, H., Aschner, M., Cheang, W. S., & Akkol, E. K. (2023). Flavonoids and Their Role in Diabetes Management. Biomedicine & Pharmacotherapy, 163, 114824. https://doi.org/10.1016/j.biopha.2023.114824

Magaji, U. F., Sacan, O., & Yanardag, R. (2022). Alpha-Amylase and Alpha-Glucosidase Inhibitory Activities of Natural Products in Diabetes Management. Current Diabetes Reviews, 18(7). https://doi.org/10.2174/1573399817666210921110436

Malikhana, A., Yuniastuti, A., Susanti, R., & Wh, N. (2021). *Prosiding Semnas Biologi ke-9 Tahun 2021 FMIPA Universitas Negeri Semarang 244*. 244–249.

Olaokun, O. O., & Zubair, M. S. (2023). *Properties of Compounds Isolated from Bioactive Ethyl Acetate Fraction of Ficus lutea Leaf Extract*.

Pinzi, L., & Rastelli, G. (2019). Molecular Docking: Shifting Paradigms in Drug Discovery. International Journal of Molecular Sciences, 20(18), 4331. https://doi.org/10.3390/ijms20184331

Prasetiyo, A., Mumpuni, E., Rahmadhani, S. H., & Amin, S. (2024). *Studi In Silico Senyawa Bioaktif pada Dan Yakon (Smallanthus sonchifolius) , Kayu Secang (Caesalpinia sappan L .), Daun Salam (Syzygium polyanthum) Sebagai Antidiabetes Mekanisme Kerja Inhibitor SGLT-2*. *6*(2), 72–85. https://doi.org/10.15408/pbsj.v6i2.39508

Sagitasa, S., Elizabeth, K., Sulaeman, L. I., Rafasafly, A., Syafra, D. W., Kristande, A., & Muchtaridi, M. (2021). *Chimica et Natura Acta Studi In Silico Senyawa Aktif Daun Singawalang (Petiveria alliacea)*. *9*(2), 58–66.