

**SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN 'AISYIYAH PALEMBANG
PROGRAM STUDI S1 FARMASI**

Skripsi, Agustus 2024

Indah Amanda Wulansari

**Studi In Silico Aktivitas Senyawa Tumbuhan Obat Di Dalam Al-Qur'an Dan
Al-Hadits Terhadap Target Reseptor Glp-1 Sebagai Anti Diabetes Tipe 2**

XIX, 75 Halaman, 5 tabel, 12 Gambar, 14 Daftar singkatan, 11 Lampiran

ABSTRAK

Latar belakang : World Health Organization(WHO) pada tahun 2020 memperkirakan bahwa hampir setengah dari semua kematian yang disebabkan oleh diabetes melitus yang terjadi sebelum usia 70 tahun. Beberapa tanaman yang diketahui memiliki aktivitas antidiabetes digunakan dalam penelitian obat, Penelitian ini dilakukan dengan metode Uji *In Silico* dengan target reseptor GLP-1 sebagai anti diabetes tipe 2. **Tujuan :** Untuk melakukan simulasi penambatan molekul dan melaksanakan simulasi dinamika molekul untuk melihat stabilitas senyawa. **Metode :** Studi *In Silico* dan simulasi dinamika molekul. **Hasil :** SBVS pada ligan senyawa tanaman obat terhadap reseptor GLP-1, didapatkan seledri (*Apium graveolens*) dengan kode LTS0097986 karena memiliki energi ikatan paling rendah yaitu -6,91 Kkal/mol, berat molekul sebesar 277,39 DA, terbentuk ikatan hidrogen Arg 121 dengan jarak ikatan hidrogen sebesar 2,29 Å. Hasil simulasi dinamika molekul seledri dipilih snapshot ke-20 -6,29 Kkal/mol jarak ikatan yaitu 1,91 Å < 3,5 Å. **Kesimpulan :** Tanaman obat seledri dengan kode LTS0097986 dianggap memiliki aktivitas senyawa yang stabil terhadap reseptor GLP-1 sebagai antidiabetes tipe 2.

Kata kunci : Diabetes Melitus, SBVS, Reseptor GLP-1, Simulasi Dinamika Molekul

Daftar Pustaka : XXIII (23) (2019-2024)

**HIGH SCHOOL OF HEALTH SCIENCE 'AISYIYAH PALEMBANG
UNDERGRADUATE PROGRAM OF PHARMACY**

Thesis, August 2024

Indah Amanda Wulansari

XIX, 75 Pages, 5 tables, 12 Figures, 14 List of abbreviations, 11 Appendices

ABSTRACT

Background : The World Health Organization (WHO) in 2020 estimated that nearly half of all deaths caused by diabetes mellitus occur before the age of 70. Several plants known to have antidiabetic activity are used in drug research. This study was conducted using the In Silico Testing method with the GLP-1 receptor as the target for type 2 diabetes. **Objective :** To conduct molecular docking simulations and perform molecular dynamics simulations to assess the stability of the compounds. **Method :** In Silico study and molecular dynamics simulation. **Results:** The SBVS of herbal compounds against the GLP-1 receptor showed that celery (*Apium graveolens*) with code LTS0097986 has the lowest binding energy of -6.91 Kcal/mol, a molecular weight of 277.39 DA, and forms a hydrogen bond with Arg 121 at a distance of 2.29 Å. The molecular dynamics simulation of celery selected snapshot 20 with a binding energy of -6.29 Kcal/mol and a bond distance of 1.91 Å < 3.5 Å. **Conclusion :** The herbal plant celery with code LTS0097986 is considered to have stable compound activity against the GLP-1 receptor as a type 2 diabetes antidiabetic.

Keywords: Diabetes Mellitus, SBVS, GLP-1 Receptor, Molecular Dynamics Simulation

Bibliography: XXIII (23) (2019-2024)