

ABSTRAK

Nama : Tri Setyo Pamungkas
Program Studi : Farmasi
Judul : Studi *In Silico* Senyawa Aktif Asam Jawa (*Tamarindus indica* L.) Sebagai Antidiabetes Melalui Inhibisi *Protein Tyrosine Phosphatase*

Daun asam jawa (*Tamarindus indica* L.) banyak dibudidayakan di negara-negara tropis, termasuk di Indonesia. Secara empiris, daun asam jawa diketahui memiliki khasiat sebagai antidiabetes. Dalam penelitian ini, metode *in silico* digunakan untuk menguji senyawa aktif yang terdapat dalam daun asam jawa (*Tamarindus indica* L.) sebagai agen antidiabetes melalui analisis skor *docking*, bagaimana sifat mirip obatnya, interaksi ligan-residu asam aminonya serta prediksi aktivitas biologi, sifat farmakokinetik dan toksisitasnya. Protein target yang digunakan adalah *Protein Tyrosine Phosphatase* (5JNT) yang terkait dengan resistensi insulin. Glimepiride dan ligan alami 5JNT digunakan sebagai ligan pembanding, sementara senyawa aktif daun asam jawa (*Tamarindus indica* L.) digunakan sebagai ligan uji. Terdapat 28 senyawa aktif yang diuji sifat mirip obat berdasarkan kaidah *Lipinski Rule of Five*, dan hanya 12 senyawa yang memenuhi kriteria tersebut yang kemudian diuji melalui proses *molecular docking* menggunakan perangkat lunak PLANTS. Berdasarkan hasil *docking*, terdapat empat senyawa yang berpotensi sebagai antidiabetes, yaitu linalool anthranilate, hexadecanol, pentadecanol, dan benzyl benzoate, dengan skor *docking* masing-masing adalah -85.889, -84.23032, -83.12325, dan -81.54821. Yang mempunyai sifat mirip obat yang baik. Interaksi yang terjadi adalah interaksi ikatan hidrofobik pada situs katalitik di antara residu cys12, arg18 dan asp129. Diprediksi dapat menjadi inhibitor *protein tyrosine phosphatase*, diabsorpsi oleh usus dengan baik dan tidak bersifat hepatotoksik.

Kata kunci: asam jawa, diabetes, resistensi insulin

ABSTRACT

Name : Tri Setyo Pamungkas
Study Program : Pharmacy
Title : *In Silico Study of Active Compound Tamarind (Tamarindus indica L.) As Antidiabetic Through Inhibition of Protein Tyrosine Phosphatase*

Tamarind (Tamarindus indica L.) leaves are widely cultivated in tropical countries, including Indonesia. Empirically, tamarind leaves are known to have anti-diabetic properties. In this study, an in silico method was used to test the active compounds found in tamarind leaves as antidiabetic agents through docking score analysis, drug-likeness, ligand-amino acid residue interactions, and predictions of biological activity, pharmacokinetics, and toxicity. The target protein used was Protein Tyrosine Phosphatase (5JNT) related to insulin resistance. Glimepiride and the native ligand 5JNT were used as reference ligands, while active compounds from tamarind leaves (Tamarindus indica L.) were used as test ligands. There were 28 active compounds tested for drug-likeness based on the Lipinski Rule of Five, and only 12 compounds that met the criteria were further tested through molecular docking using PLANTS software. Based on the docking results, there were four compounds with potential as antidiabetic agents, namely linalool anthranilate, hexadecanol, pentadecanol, and benzyl benzoate, with docking scores of -85.889, -84.23032, -83.12325, and -81.54821, respectively. These compounds had good drug-like properties. The interactions that occurred were hydrophobic binding interactions at the catalytic site between residues cys12, arg18, and asp129. They were predicted to be inhibitors of protein tyrosine phosphatase, well-absorbed by the gut, and not hepatotoxic.

Keywords: diabetes, insulin resistance, tamarind.