

Studi Biotekfarmaka *Molecular Docking* Viteksin dari Kearifan Lokal Kombucha Bunga Telang (*Clitoria ternatea* L) sebagai Kandidat Antidiabetes

Wijayanti Wijayanti^{1*}, Suyanto Suyanto¹, Ida Untari¹, Retno Dwi Novianti¹,
Firman Rezaldi², Yugga Tri Surahman³

^{1*} Program Studi Kebidanan, Keperawatan, Gizi, Institut Teknologi Sains dan Kesehatan, PKU Muhammadiyah, Surakarta, Jawa Tengah, Indonesia

² Program Studi Doktor Ilmu Pangan, Departemen Ilmu Pangan dan Bioteknologi, Fakultas Teknologi Agroindustri dan Biosistem, Universitas Brawijaya Malang, Jawa Timur, Indonesia

³ Program Studi Pendidikan Guru Sekolah Dasar, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Pendidikan Ganesha, Bali, Indonesia

*Penulis koresponden : wijaya.pw@itspku.ac.id

Keywords	Abstract
Antidiabetic; Butterfly Pea Flower; Kombucha; Compounds; Vitexin	Diabetes mellitus is a chronic metabolic disorder characterized by elevated blood glucose levels, necessitating the development of effective and relatively safe therapeutic candidates. Butterfly pea flower (<i>Clitoria ternatea</i> L.) kombucha is a natural-based fermented product containing various bioactive compounds, including vitexin. This study aimed to analyze the potential of vitexin from butterfly pea flower kombucha as an antidiabetic candidate using an in silico approach involving molecular docking and the prediction of absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity (ADME-Tox) profiles. The three-dimensional structure of the α -glucosidase enzyme (PDB code 8D43) served as the target receptor, while vitexin was used as the test ligand and glucose as the reference compound. Molecular docking was performed using AutoDockTools and AutoDock Vina, and ligand-receptor interactions were visualized using Discovery Studio Visualizer. ADME profiling was conducted using SwissADME, and toxicity prediction was performed using Toxtree. Molecular docking results revealed that vitexin had a binding affinity of -7.4 kcal/mol, which was lower (indicating stronger binding) than that of glucose (-4.9 kcal/mol). Interaction visualization showed the presence of hydrogen and hydrophobic interactions between vitexin and amino acid residues within the active site of α -glucosidase. ADME predictions indicated that vitexin met the analyzed pharmacokinetic parameters, while toxicity predictions classified it as Toxicity Class 4, with no predicted carcinogenic, hepatotoxic, or skin-toxic effects. Based on these results, vitexin demonstrates potential as an antidiabetic candidate capable of interacting with the α -glucosidase enzyme; however, these findings remain predictive and require confirmation through in vitro and in vivo testing.
Kata Kunci	Abstrak
Antidiabetes; bunga telang;	Diabetes melitus merupakan gangguan metabolik kronis yang ditandai dengan peningkatan kadar glukosa darah dan memerlukan pengembangan kandidat

kombucha; molecular docking; ADME; toksisitas; viteksin.	terapi yang efektif dan relatif aman. Kombucha bunga telang (<i>Clitoria ternatea</i> L.) merupakan produk fermentasi berbasis bahan alam yang mengandung berbagai senyawa bioaktif, salah satunya viteksin. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi senyawa viteksin dari kombucha bunga telang sebagai kandidat antidiabetes melalui pendekatan <i>in silico</i> menggunakan <i>molecular docking</i> serta prediksi profil absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas (ADME-toksistas). Struktur tiga dimensi enzim α -glukosidase dengan kode PDB 8D43 digunakan sebagai reseptor target, sedangkan viteksin digunakan sebagai ligan uji dan glukosa sebagai pembanding. Molecular docking dilakukan menggunakan AutoDockTools dan AutoDock Vina, sedangkan visualisasi interaksi ligan-reseptor dilakukan menggunakan Discovery Studio Visualizer. Prediksi profil ADME dilakukan menggunakan SwissADME dan prediksi toksistas menggunakan Toxtree. Hasil molecular docking menunjukkan bahwa viteksin memiliki nilai <i>binding affinity</i> sebesar -7,4 kkal/mol, lebih rendah dibandingkan glukosa sebesar -4,9 kkal/mol. Visualisasi interaksi menunjukkan adanya interaksi hidrogen dan interaksi hidrofobik antara viteksin dengan residu asam amino pada sisi aktif α -glukosidase. Hasil prediksi ADME menunjukkan bahwa viteksin memenuhi parameter farmakokinetik yang dianalisis, sedangkan prediksi toksistas menunjukkan viteksin termasuk dalam kelas toksistas 4 dan tidak diprediksi bersifat karsinogenik maupun toksik terhadap hati dan kulit. Berdasarkan hasil tersebut, viteksin menunjukkan potensi sebagai kandidat senyawa antidiabetes yang dapat berinteraksi dengan enzim α -glukosidase. Namun, temuan ini masih bersifat prediktif dan perlu dikonfirmasi melalui pengujian <i>in vitro</i> dan <i>in vivo</i>
--	---

©JIFA: JURNAL ILMIAH FARMASI ATTAMRU
D 3 Farmasi Universitas Islam Madura

PENDAHULUAN

Bahan pangan fungsional berbasis fermentasi semakin banyak dikembangkan karena berpotensi menghasilkan produk dengan kandungan senyawa bioaktif yang memiliki nilai kesehatan dan farmakologis. Salah satu produk fermentasi berbasis bahan alam yang banyak dikaji adalah kombucha bunga telang (*Clitoria ternatea* L.). Bunga telang diketahui mengandung berbagai metabolit sekunder, terutama golongan flavonoid, yang berpotensi memberikan aktivitas biologis. Proses fermentasi pada pembuatan kombucha dapat menghasilkan perubahan komposisi metabolit sehingga berpotensi meningkatkan nilai fungsional produk. Beberapa penelitian sebelumnya telah melaporkan potensi kombucha bunga telang sebagai sumber senyawa bioaktif dengan aktivitas antioksidan, antimikroba, antifungi, dan aktivitas farmakologis lainnya (Abdilah et al., 2022; Rezaldi et al., 2021; Puspitasari et al., 2022; Rezaldi et al., 2022; Rezaldi et al., 2024).

Salah satu senyawa bioaktif yang terdapat pada bunga telang adalah viteksin, yaitu senyawa flavonoid C-glikosida yang secara struktural termasuk turunan flavonoid.

Viteksin telah menjadi perhatian dalam penelitian bioteknologi komputasi karena karakteristik strukturnya memungkinkan terjadinya interaksi dengan berbagai target protein yang berkaitan dengan aktivitas biologis. Penelitian sebelumnya juga telah mengeksplorasi potensi viteksin melalui pendekatan bioinformatika, termasuk dalam kajian aktivitas antioksidan dan antikanker (Fadillah *et al.*, 2024). Oleh karena itu, kajian terhadap interaksi viteksin dengan target protein yang berhubungan dengan metabolisme glukosa menjadi penting untuk dilakukan.

Diabetes melitus merupakan gangguan metabolik kronis yang ditandai dengan peningkatan kadar glukosa darah dan dapat menyebabkan berbagai komplikasi apabila tidak dikendalikan. Salah satu target penting dalam pengendalian kadar glukosa darah adalah enzim α -glukosidase. Enzim ini berperan dalam proses pemecahan karbohidrat menjadi glukosa. Penghambatan aktivitas α -glukosidase dapat memperlambat hidrolisis karbohidrat dan berpotensi mengurangi peningkatan kadar glukosa setelah konsumsi makanan. Oleh karena itu, α -glukosidase dapat digunakan sebagai salah satu target molekuler dalam pencarian kandidat senyawa antidiabetes berbasis bahan alam (Wijayanti *et al.*, 2026).

Pendekatan *in silico* melalui molecular docking dapat digunakan untuk memprediksi kemampuan suatu senyawa dalam berinteraksi dengan protein target berdasarkan nilai afinitas ikatan dan pola interaksi ligan–reseptor. Pendekatan ini memungkinkan proses skrining awal terhadap senyawa bioaktif sebelum dilakukan pengujian biologis secara *in vitro* maupun *in vivo*. Selain *molecular docking*, prediksi profil absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi (ADME) serta toksisitas dapat digunakan untuk memperoleh gambaran awal mengenai karakteristik farmakokinetik dan keamanan suatu kandidat senyawa. Kombinasi molecular docking, prediksi ADME, dan toksisitas dapat memberikan informasi awal yang lebih komprehensif mengenai kelayakan suatu senyawa untuk dikembangkan sebagai kandidat bioaktif (Kurniawati *et al.*, 2023).

Berdasarkan uraian tersebut, viteksin dari kombucha bunga telang memiliki peluang untuk dikaji lebih lanjut sebagai kandidat senyawa antidiabetes melalui pendekatan bioteknologi komputasi. Penelitian ini dilakukan untuk menganalisis interaksi molekuler viteksin terhadap enzim α -glukosidase melalui *molecular docking* serta mengevaluasi prediksi profil ADME dan toksisitasnya. Hasil penelitian diharapkan

dapat memberikan informasi awal mengenai potensi viteksin sebagai kandidat senyawa antidiabetes berbasis bahan alam yang selanjutnya dapat dikonfirmasi melalui pengujian biologis secara eksperimental.

METODE

Desain dan Waktu Penelitian

Penelitian ini merupakan penelitian deskriptif eksploratif berbasis *in silico* untuk menganalisis potensi senyawa viteksin dari kombucha bunga telang (*Clitoria ternatea* L.) sebagai kandidat antidiabetes melalui *molecular docking*, prediksi profil farmakokinetik (ADME), dan prediksi toksisitas. Penelitian dilaksanakan pada bulan Juli–Agustus 2025 di Laboratorium Service Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA), Universitas Pakuan, Bogor.

Alat dan Bahan Penelitian

Perangkat keras yang digunakan berupa komputer Lenovo System Model 82R7 dengan prosesor 12th Gen Intel® Core™ i5-1235U, memori 16 GB RAM, dan sistem operasi yang mendukung perangkat lunak analisis *in silico*. Perangkat lunak dan basis data yang digunakan meliputi Microsoft Excel 2021, PubChem, Protein Data Bank (PDB), MarvinSketch, VegaZZ, AutoDockTools, AutoDock Vina, PyMOL, Discovery Studio Visualizer, SwissADME, dan Toxtree.

Bahan yang digunakan dalam penelitian berupa struktur tiga dimensi senyawa viteksin sebagai ligan uji, struktur enzim α -glukosidase sebagai reseptor dengan PDB ID 8D43, serta glukosa sebagai senyawa pembanding. Struktur molekul viteksin diperoleh dari basis data PubChem, sedangkan struktur protein target diperoleh dari Protein Data Bank.

Tahapan Penelitian

Tahapan penelitian meliputi: (1) pengunduhan dan preparasi struktur protein α -glukosidase; (2) pengunduhan dan preparasi struktur ligan viteksin; (3) validasi metode *molecular docking* melalui *redocking* ligan native; (4) *molecular docking* viteksin terhadap α -glukosidase; (5) visualisasi interaksi ligan–reseptor; (6) prediksi profil ADME; dan (7) prediksi toksisitas.

Pengunduhan dan Preparasi Protein Target

Struktur tiga dimensi enzim α -glukosidase diperoleh dari Protein Data Bank (PDB) dengan kode PDB ID 8D43. Struktur protein yang diperoleh dipersiapkan menggunakan AutoDockTools. Preparasi protein dilakukan dengan menghilangkan molekul air dan memisahkan ligan yang terdapat pada kompleks protein, kemudian menambahkan atom hidrogen polar dan muatan parsial yang diperlukan untuk proses molecular docking. Struktur protein hasil preparasi selanjutnya disimpan dalam format PDBQT. (Mc Conkey *et al.*, 2022).

Penentuan situs aktif dilakukan berdasarkan posisi ligan native pada kompleks protein. Grid box kemudian ditentukan untuk mencakup area situs pengikatan yang relevan dengan aktivitas katalitik α -glukosidase.

Preparasi Ligan Viteksin

Struktur dua dimensi senyawa viteksin diperoleh melalui basis data PubChem. Struktur tersebut kemudian dibuat dan diperiksa menggunakan MarvinSketch berdasarkan informasi struktur atau SMILES senyawa viteksin. Struktur tiga dimensi ligan selanjutnya dioptimasi secara geometris menggunakan VegaZZ untuk memperoleh konformasi dengan kondisi energi yang sesuai sebelum digunakan dalam proses *molecular docking*. (Urief *et al.*, 2011).

Ligan hasil preparasi disimpan dalam format yang kompatibel dengan perangkat lunak *molecular docking*, yaitu PDBQT, setelah dilakukan penyesuaian atom hidrogen berdasarkan muatan yang dibutuhkan.

Validasi *Molecular Docking*

Validasi metode molecular docking dilakukan melalui metode *redocking*, yaitu dengan menambatkan kembali ligan native pada protein target α -glukosidase. Proses *redocking* dilakukan menggunakan AutoDockTools dan AutoDock Vina pada lokasi pengikatan yang sama dengan *ligan native*.

Validitas protokol docking dievaluasi berdasarkan nilai Root Mean Square Deviation (RMSD) antara posisi ligan hasil *redocking* dengan posisi ligan native pada struktur kristal. Nilai $\text{RMSD} \leq 2,5 \text{ \AA}$ digunakan sebagai batas penerimaan validitas

metode docking. Visualisasi posisi ligan dilakukan menggunakan PyMOL(Schoichet, 2004).

Molecular Docking Viteksin terhadap α -Glukosidase

Setelah protokol docking dinyatakan valid, dilakukan *molecular docking* terhadap ligan uji berupa viteksin dan senyawa pembanding berupa glukosa. Docking dilakukan menggunakan AutoDock Vina dengan protein α -glukosidase sebagai reseptor dan area grid box yang telah ditentukan berdasarkan situs pengikatan ligan native (Jain, 2004).

Parameter utama yang diamati adalah nilai *binding affinity* yang dinyatakan dalam kkal/mol. Nilai *binding affinity* yang lebih rendah menunjukkan prediksi afinitas ikatan yang lebih kuat antara ligan dan reseptor. Hasil *docking* selanjutnya digunakan untuk menentukan pose atau orientasi ligan yang paling memungkinkan pada situs aktif α -glukosidase.

Analisis dan Visualisasi Interaksi Ligan–Reseptor

Kompleks hasil molecular docking divisualisasikan menggunakan Discovery Studio Visualizer dalam bentuk dua dimensi (2D) dan tiga dimensi (3D). Analisis dilakukan terhadap jenis interaksi antara viteksin dan residu asam amino pada sisi pengikatan α -glukosidase.

Interaksi yang diamati meliputi ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik, interaksi π – π , dan interaksi π –alkil apabila terbentuk. Pola interaksi viteksin kemudian dibandingkan dengan interaksi ligan pembanding untuk memperoleh gambaran mengenai kemungkinan keterikatan viteksin pada situs aktif α -glukosidase.

Prediksi Profil ADME

Prediksi profil farmakokinetik dilakukan menggunakan SwissADME. Struktur atau SMILES senyawa viteksin dimasukkan ke dalam sistem SwissADME untuk memperoleh prediksi karakteristik absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi (ADME).

Parameter yang diamati meliputi karakteristik fisikokimia dan parameter farmakokinetik yang tersedia pada SwissADME, termasuk evaluasi terhadap aturan Lipinski sebagai salah satu parameter awal *drug-likeness*. Hasil prediksi digunakan untuk

memberikan gambaran awal mengenai karakteristik farmakokinetik viteksin sebagai kandidat senyawa bioaktif.

Prediksi Toksisitas

Prediksi toksisitas senyawa viteksin dilakukan menggunakan perangkat lunak Toxtree. Analisis dilakukan berdasarkan parameter toksikologi yang tersedia pada perangkat lunak tersebut, termasuk *Cramer Rule* dan sistem prediksi toksisitas yang tersedia. Hasil prediksi digunakan untuk memperoleh gambaran awal mengenai potensi toksik dan keamanan senyawa viteksin. Data toksisitas diinterpretasikan sebagai hasil prediksi komputasi dan tidak dianggap sebagai bukti toksisitas atau keamanan secara eksperimental.

Analisis Data

Data *molecular docking* dianalisis berdasarkan nilai *binding affinity*, RMSD hasil validasi, dan pola interaksi ligan–reseptor. Data prediksi ADME dan toksisitas dianalisis secara deskriptif berdasarkan parameter yang dihasilkan oleh masing-masing perangkat lunak. Seluruh hasil digunakan untuk mengevaluasi potensi viteksin sebagai kandidat senyawa antidiabetes secara *in silico*.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Preparasi Makromolekul Target α -Glukosidase

Struktur tiga dimensi enzim α -glukosidase yang digunakan sebagai protein target diperoleh dari Protein Data Bank (PDB) dengan kode PDB ID 8D43. Struktur tersebut digunakan sebagai reseptor dalam analisis *molecular docking* untuk mengevaluasi potensi interaksi senyawa viteksin dengan sisi aktif enzim α -glukosidase. Pada tahap preparasi, struktur protein dibersihkan dari molekul air dan komponen yang tidak dibutuhkan dalam proses docking, kemudian dilakukan penambahan atom hidrogen polar dan penyesuaian muatan menggunakan AutoDockTools. Situs pengikatan ditentukan berdasarkan posisi ligan native pada struktur kompleks protein.

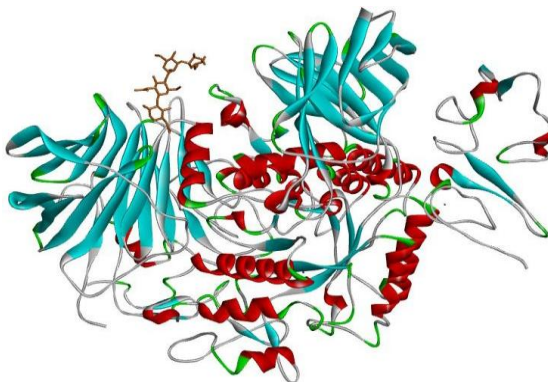
Preparasi protein merupakan tahap penting dalam *molecular docking* karena struktur reseptor yang digunakan akan memengaruhi hasil prediksi interaksi ligan–reseptor. Dalam penelitian ini, penentuan area docking dilakukan pada wilayah yang berkaitan dengan situs pengikatan ligan native sehingga interaksi viteksin dapat dianalisis pada lokasi yang relevan secara struktural.

Preparasi dan Karakteristik Ligan Viteksin

Ligan yang digunakan dalam penelitian ini adalah viteksin, yaitu senyawa flavonoid C-glikosida yang diperoleh dari basis data PubChem. Struktur viteksin

kemudian dipersiapkan dalam bentuk tiga dimensi dan dilakukan optimasi geometri sebelum digunakan dalam *molecular docking*.

Secara struktural, viteksin memiliki gugus hidroksil dan sistem cincin aromatik serta bagian glikosida yang memungkinkan terbentuknya berbagai interaksi dengan residu asam amino pada protein target. Keberadaan gugus polar pada struktur viteksin memungkinkan pembentukan interaksi hidrogen, sedangkan bagian aromatik dapat berkontribusi terhadap interaksi nonpolar dengan residu pada sisi pengikatan protein (Gambar 1).



Gambar 1. Struktur Kimia dua dimensi senyawa viteksin

Preparasi struktur ligan diperlukan untuk memperoleh konformasi yang sesuai sebelum proses docking. Struktur tiga dimensi yang telah dipreparasi kemudian digunakan sebagai ligan uji terhadap enzim α -glukosidase.

Validasi *Molecular Docking*

Validasi *molecular docking* dilakukan melalui metode *redocking* ligan native terhadap protein target. Validasi ini bertujuan untuk mengetahui kemampuan protokol docking dalam mereproduksi posisi ligan pada situs pengikatan protein.

Hasil validasi menunjukkan nilai RMSD sebesar **1,836 Å**. Nilai tersebut berada di bawah batas 2,5 Å yang digunakan dalam penelitian ini sebagai kriteria penerimaan validitas protokol docking. Hasil tersebut menunjukkan bahwa protokol molecular docking yang digunakan memiliki kemampuan yang memadai dalam mereproduksi posisi ligan native pada situs pengikatan protein (Tabel 1).

Tabel 1. Hasil validasi *molecular docking* melalui metode *redocking*

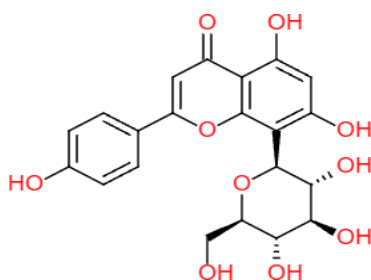
Parameter	Hasil
Binding affinity terbaik	-4,63
RMSD	1,836 Å
Kriteria RMSD	$\leq 2,5$ Å
Status validasi	Memenuhi kriteria

Nilai RMSD yang rendah menunjukkan adanya kesesuaian antara pose ligan hasil *redocking* dan posisi ligan native pada struktur protein. Dengan demikian, protokol docking yang digunakan dapat diterapkan untuk menganalisis interaksi viteksin terhadap protein target.

Molecular Docking Viteksin terhadap α -Glukosidase

Setelah protokol docking dinyatakan memenuhi kriteria validasi, molecular docking dilakukan terhadap senyawa viteksin. Hasil docking menunjukkan bahwa viteksin memiliki nilai *binding affinity* sebesar $-7,4$ kkal/mol, sedangkan glukosa sebagai senyawa pembanding memiliki nilai sebesar $-4,9$ kkal/mol. Nilai *binding affinity* yang lebih rendah menunjukkan prediksi afinitas ikatan yang lebih kuat dalam simulasi docking.

Hasil tersebut menunjukkan bahwa berdasarkan simulasi komputasi, viteksin memiliki afinitas prediksi yang lebih baik terhadap α -glukosidase dibandingkan glukosa yang digunakan sebagai pembanding. Namun, hasil *molecular docking* tidak dapat secara langsung diinterpretasikan sebagai bukti penghambatan enzim secara eksperimental. Hasil ini lebih tepat digunakan sebagai indikasi awal adanya kemungkinan interaksi viteksin dengan target α -glukosidase (Gambar 2).



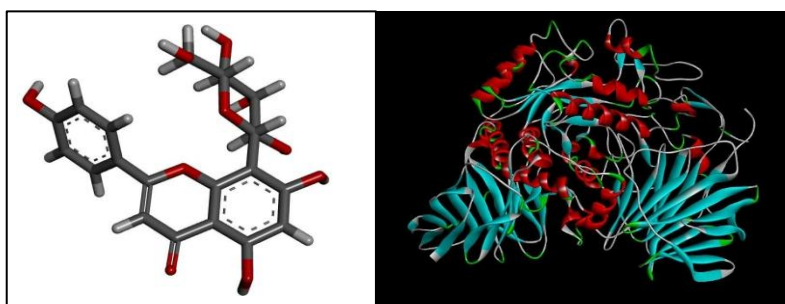
Gambar 2. Hasil *molecular docking* senyawa viteksin terhadap enzim α -glukosidase

Perbedaan nilai *binding affinity* tersebut menunjukkan bahwa viteksin memiliki kemungkinan membentuk kompleks yang relatif stabil dengan protein target. Meskipun demikian, kekuatan interaksi yang diprediksi melalui docking perlu dikonfirmasi melalui pengujian biologis, khususnya uji inhibisi α -glukosidase secara *in vitro*.

Analisis Interaksi Viteksin dengan Residu Asam Amino α -Glukosidase

Visualisasi kompleks viteksin- α -glukosidase dilakukan menggunakan *Discovery Studio Visualizer* untuk mengidentifikasi interaksi antara ligan dan residu asam amino pada sisi pengikatan protein. Hasil visualisasi menunjukkan adanya beberapa jenis interaksi molekuler, terutama interaksi hidrogen dan interaksi hidrofobik.

Interaksi hidrogen dapat terjadi melalui gugus hidroksil pada struktur viteksin dengan residu asam amino yang memiliki karakteristik polar. Interaksi tersebut dapat berkontribusi terhadap kestabilan kompleks ligan-reseptor. Selain itu, bagian cincin aromatik pada viteksin dapat berkontribusi terhadap interaksi hidrofobik dengan residu nonpolar pada area pengikatan (Gambar 3).



Gambar 3. Visualisasi interaksi molekuler viteksin dengan α -glukosidase dalam bentuk 2D dan 3D

Visualisasi tiga dimensi menunjukkan bahwa viteksin berada pada kantong pengikatan protein target. Orientasi ligan pada kantong tersebut memberikan indikasi bahwa struktur viteksin dapat beradaptasi dengan lingkungan sisi pengikatan α -glukosidase. Interaksi yang terbentuk menjadi salah satu dasar untuk menjelaskan nilai *binding affinity* yang diperoleh dari *molecular docking*.

Namun, keberadaan interaksi molekuler dalam simulasi *docking* belum dapat memastikan mekanisme inhibisi enzim secara eksperimental. Oleh karena itu, hasil interaksi ini harus dipandang sebagai prediksi awal yang memerlukan validasi melalui pengujian aktivitas α -glukosidase secara *in vitro*.

Prediksi Profil ADME (Adsorpsi, Distribusi, Metabolisme, dan Eksresi) Viteksin

Prediksi profil farmakokinetik senyawa viteksin dilakukan menggunakan SwissADME. Analisis ini bertujuan memperoleh gambaran awal mengenai karakteristik absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi senyawa berdasarkan struktur molekulnya. Hasil prediksi menunjukkan bahwa viteksin memenuhi parameter ADME yang dianalisis dalam penelitian ini dan dapat dievaluasi berdasarkan aturan Lipinski sebagai salah satu parameter *drug-likeness*. Hasil tersebut menunjukkan bahwa berdasarkan prediksi komputasi, viteksin memiliki karakteristik fisikokimia yang dapat dipertimbangkan untuk pengembangan lebih lanjut sebagai kandidat senyawa bioaktif (Tabel 2).

Tabel 2. Prediksi profil ADME dan drug-likeness senyawa viteksin

Parameter	Hasil prediksi
Senyawa	Viteksin
Analisis	SwissADME
Profil	ADME
Drug-likeness	Berdasarkan aturan Lipinski
Interpretasi	Kandidat untuk kajian lebih lanjut

Hasil prediksi ADME tidak dapat disamakan dengan hasil pengukuran farmakokinetik pada hewan atau manusia. Oleh karena itu, hasil ini hanya memberikan gambaran awal mengenai karakteristik farmakokinetik viteksin dan masih memerlukan konfirmasi melalui penelitian eksperimental.

Prediksi Toksisitas Viteksin

Prediksi toksisitas dilakukan menggunakan perangkat lunak Toxtree. Berdasarkan hasil prediksi yang diperoleh, viteksin termasuk dalam kelas toksisitas 4. Selain itu, hasil prediksi yang dilaporkan dalam penelitian menunjukkan bahwa viteksin tidak diprediksi memiliki potensi karsinogenik serta tidak diprediksi toksik terhadap hati dan kulit (tabel 3).

Tabel 3. Prediksi toksisitas senyawa viteksin

Parameter	Hasil
Senyawa	Viteksin
Perangkat lunak	Toxtree
Kelas toksisitas	Kelas 4
Potensi karsinogenik	Tidak diprediksi
Toksisitas hati	Tidak diprediksi
Toksisitas kulit	Tidak diprediksi

Hasil tersebut memberikan informasi awal mengenai profil keamanan viteksin berdasarkan pendekatan komputasi. Namun, hasil prediksi toksisitas tidak dapat menggantikan pengujian toksikologi secara eksperimental. Oleh karena itu, diperlukan penelitian lanjutan untuk mengonfirmasi profil keamanan viteksin melalui uji *in vitro*, *in vivo*, dan apabila diperlukan pengujian toksikologi yang lebih komprehensif.

Integrasi Hasil Molecular Docking, ADME, dan Toksisitas

Secara keseluruhan, hasil penelitian menunjukkan bahwa viteksin memiliki potensi untuk berinteraksi dengan enzim α -glukosidase berdasarkan *molecular docking*. Nilai *binding affinity* sebesar $-7,4$ kkal/mol lebih rendah dibandingkan glukosa sebesar $-4,9$ kkal/mol, sedangkan hasil visualisasi menunjukkan adanya interaksi molekuler antara viteksin dan residu asam amino pada sisi pengikatan protein.

Selain hasil docking, prediksi ADME menunjukkan karakteristik farmakokinetik yang dapat dipertimbangkan dalam pengembangan lebih lanjut, sedangkan prediksi toksisitas menunjukkan profil toksisitas yang relatif rendah berdasarkan parameter yang digunakan. Dengan demikian, kombinasi hasil molecular docking, ADME, dan toksisitas memberikan dasar komputasi awal untuk mempertimbangkan viteksin sebagai kandidat senyawa antidiabetes.

Meskipun demikian, penelitian ini merupakan studi *in silico*, sehingga hasil yang diperoleh bersifat prediktif. Afinitas ikatan, pola interaksi, karakteristik ADME, dan

profil toksisitas yang diperoleh belum dapat dianggap sebagai bukti efektivitas maupun keamanan secara biologis. Penelitian lanjutan berupa uji inhibisi α -glukosidase secara *in vitro*, pengujian aktivitas biologis, serta penelitian *in vivo* diperlukan untuk mengonfirmasi potensi viteksin sebagai kandidat antidiabetes.

KESIMPULAN

Viteksin dari kombucha bunga telang (*Clitoria ternatea* L.) berpotensi sebagai kandidat antidiabetes berdasarkan pendekatan *in silico*. Viteksin menunjukkan *binding affinity* sebesar $-7,4$ kkal/mol terhadap α -glukosidase, lebih baik dibandingkan glukosa sebesar $-4,9$ kkal/mol, serta membentuk interaksi hidrogen dan hidrofobik dengan residu protein target. Prediksi ADME menunjukkan karakteristik yang mendukung pengembangan lebih lanjut, sedangkan prediksi toksisitas menempatkan viteksin pada kelas toksisitas 4 tanpa prediksi karsinogenik, hepatotoksik, dan toksisitas kulit. Hasil ini masih bersifat prediktif dan perlu dikonfirmasi melalui uji *in vitro* dan *in vivo*.

DAFTAR RUJUKAN

- Abdilah, N. A., Rezaldi, F., Pertiwi, F. D., & Fadillah, M. F. (2022). fitokimia dan skrining awal metode bioteknologi fermentasi kombucha bunga telang (*Clitoria Ternatea* L) sebagai bahan aktif sabun cuci tangan probiotik. *MEDFARM: Jurnal Farmasi dan Kesehatan*, 11(1), 44-61.
- Fadillah, M. F., Hariadi, H., Rezaldi, F., & Setyaji, D. Y. (2022). Karakteristik biokimia dan mikrobiologi pada larutan fermentasi kedua kombucha bunga telang (*Clitoria Ternatea* L) sebagai inovasi produk bioteknologi terkini. *Jurnal Biogenerasi*, 7(2), 19-34.
- Fadillah, M. F., Rezaldi, F., Fadila, R., Andry, M., Pamungkas, B. T., Mubarak, S., ... & Maritha, V. (2024). Studi Bioteknologi Komputasi (Bioinformatika) Senyawa Vitexin Pada Kombucha Bunga Telang Vitexin Sebagai Antioksidan dan Antikanker. *Jurnal Gizi Kerja dan Produktivitas*, 5(1), 60-67.
- Fathurrohman, M. F., Rezaldi, F., Kolo, Y., Somantri, U. W., Fadillah, M. F., & Mathar, I. (2023). Aktivitas Farmakologi Pada Kombucha Bunga Telang (*Clitoria ternatea* L) Dalam Menurunkan Kolesterol Ayam Petelur (*Gallus domesticus*) Dengan Metode Bioteknologi Fermentasi. *Jurnal Gizi Kerja dan Produktivitas*, 4(1), 28-35.
- Gohlke, H., & Klebe, G. (2002). Approaches to the description and prediction of the binding affinity of small-molecule ligands to macromolecular receptors. *Angewandte Chemie International Edition*, 41(15), 2644–2676.
- Husein, A. S., Rezaldi, F., Pamungkas, B. T., Suminar, E., Maritha, V., & Gumilar, R. (2025). Formulasi Sediaan Sabun Wajah Berbahan Aktif Ekstrak Sarang Burung Wallow Dan

- Scooby Kombucha Sebagai Antipenuaan Berdasarkan Daya Hambat Enzim Tirosinase. *Jurnal Ilmiah Farmasi Attamru (JIFA)*, 6(1), 26-37.
- Kolo, Y., Rezaldi, F., Fadillah, M. F., Trisnawati, D., Pamungkas, B. T., Ma'ruf, A., & Pertiwi, F. D. (2022). Antikolesterol Pada Ayam Boiler (*Gallus domesticus*) Dari Bunga Telang (*Clitoria ternatea* L) Melalui Metode Bioteknologi Fermentasi Kombucha: Antikolesterol in Boiler Chicken (*Gallus domesticus*) from Telang Flower (*Clitoria Ternatea* L) Through Kombucha Fermentation Biotechnology Method. *Jurnal teknologi pangan dan ilmu pertanian (JIPANG)*, 4(2), 30-36.
- Kurniawati, N., Saputri, I. S. P. A., & Rezaldi, F. (2023). Study of Computational Biotechnology (Bioinformatics) on Telang Flower Kombucha (*Clitoria Terantea* L) as an Immunomodulator to Suppress Immunoglobulin E (IgE) for Allergy Sufferers. *Jurnal Biologi Tropis*, 23(2), 348-354.
- Kusumiyati, K., Setyaji, D. Y., Fadillah, M. F., & Rezaldi, F. (2022). Uji Daya Hambat Madu Hutan Baduy Sebagai Substrat Pada Bunga Telang (*Clitoria ternatea* L) Melalui Metode Bioteknologi Fermentasi Kombucha Dalam Menghambat Pertumbuhan Bakteri Patogen. *Medfarm: Jurnal Farmasi Dan Kesehatan*, 11(2), 142-160.
- Meng, X. Y., Zhang, H. X., Mezei, M., & Cui, M. (2011). Molecular docking: A powerful approach for structure-based drug discovery. *Current Computer-Aided Drug Design*, 7(2), 146–157.
- McConkey, B. J., Sobolev, V., & Edelman, M. (2002). The performance of current methods in ligand–protein docking. *Current Science*, 83(7), 845–856.
- Mu'jijah, M. J., Abdilah, N. A., Rezaldi, F., Kusumiyati, K., Setyaji, D. Y., & Fadillah, M. F. (2023). Fermentasi Bunga Telang (*Clitoria ternatea* L) Dengan Penambahan Madu Baduy Produk SR12 Sebagai Inovasi Bioteknologi Kombucha. *Jurnal Ilmiah Biosaintropis (Bioscience-Tropic)*, 8(2), 1-17.
- Nurmaulawati, R., Rezaldi, F., Susilowati, A. A., Waskita, K. N., Puspita, S., & Rosalina, V. (2022). Antimikroba Pada Produk Bioteknologi Farmasi Berupa Sediaan Obat Kumur Kombucha Bunga Telang (*Clitoria ternatea* L). *Jurnal Ilmiah Farmasi Attamru (JIFA)*, 3(2), 1-16.
- Puspitasari, M., Rezaldi, F., Handayani, E. E., & Jubaedah, D. (2022). Kemampuan bunga telang (*Clitoria ternatea* L) sebagai antimikroba (*listeria monocytogenes*, *staphylococcus hominis*, *trycophyton mentagrophytes*, dan *trycophyton rubrum*) melalui metode bioteknologi fermentasi kombucha. *Jurnal Medical Laboratory*, 1(2), 1-10.
- Rezaldi, F., Ningtyas, R. Y., Anggraeni, S. D., Ma'ruf, A., Fatonah, N. S., Pertiwi, F. D., ... & Subekhi, A. I. (2021). Pengaruh metode bioteknologi fermentasi kombucha bunga telang

- (Clitoria ternatea L) sebagai antibakteri gram positif dan negatif. *Jurnal Biotek*, 9(2), 169-185.
- Rezaldi, F., & Pertiwi, F. D. (2022). Potensi bunga telang (Clitoria Ternatea L) sebagai antifungi Candida Albicans, malasezia furfur, pitosporum ovale, dan aspergillus fumigatus dengan metode bioteknologi fermentasi kombucha. *Jurnal Fisioterapi Dan Ilmu Kesehatan Sisthana*, 4(2), 30-35.
- Rezaldi, F., Setiawan, U., Kusumiyati, K., Trisnawati, D., Fadillah, M. F., & Setyaji, D. Y. (2022). Bioteknologi kombucha bunga telang (Clitoria ternatea L) dengan variasi gula stevia sebagai antikolesterol pada bebek pedaging. *Jurnal Dunia Farmasi*, 6(3), 156-169.
- Rezaldi, F., Fadillah, M. F., Agustiansyah, L. D., Trisnawati, D., & Pertiwi, F. D. (2022). Pengaruh metode bioteknologi fermentasi kombucha bunga telang (Clitoria ternatea L) sebagai penurun kadar kolesterol bebek pedaging berdasarkan konsentrasi gula aren yang berbeda-beda. *Jurnal Biogenerasi*, 7(2), 57-67.
- Rezaldi, F., Millah, Z., Susiyanti, S., Gumilar, R., & Yenny, R. F. (2024). Peran Biotek Gen Tanaman Pada Bidang Pangan dan Farmasi Sebagai Bahan Sediaan Pangan Fungsional, Bahan Aktif Obat dan Kosmetik Natural. *Jurnal Agroteknologi Merdeka Pasuruan*, 8(1), 01-09.
- Rezaldi, F., Rahmad, S. S., Ginaris, R. P., Wijayanti, W. I. J. A. Y. A. N. T. I., Trisnawati, D., Fadillah, M. F., ... & Sasmita, H. (2024). Penyuluhan Cara Konsumsi Kombucha Bunga Telang Sebagai Minuman Probiotik Bagi Pasien Kolesterol bagi Masyarakat Kampung Pekuncen Cilegon Banten. *Jurnal Relawan dan Pengabdian Masyarakat REDI*, 2(2), 14-25.
- Rezaldi, F., Utami, A. W., Wijayanti, F. E. R., Purbanova, R., Wati, D. R., Suminar, E., ... & Yenny, R. F. (2024). Aktivitas Antioksidan Pada Sediaan Kombucha Bunga Telang Yang Diracik Dari Formulasi Gula Aren Dan Madu Sr12 Sebagai Produk Bioteknologi Pangan Dan Farmasi. *Agribios*, 22(2), 165-175.
- Rezaldi, F., Surahman, Y. T., Susilo, H., Suminar, E., Mubarok, S., & Kurniawan, M. (2026). Pengembangan Kombucha Herbal Berbasis Kearifan Lokal sebagai Sediaan Pangan Fungsional dalam Perspektif Farmasi pada Pembelajaran Mata Kuliah Herbal di Program Studi D3 Keperawatan STIKes Tujuh Belas Karanganyar Tahun 2025. *Jurnal Medika: Medika*, 2772-2779.
- Shoichet, B. K. (2004). Virtual screening of chemical libraries. *Nature*, 432(7019), 862–865.
- Situmeang, B., Shidqi, M. M. A., & Rezaldi, F. (2022). The effect of fermentation time on antioxidant and organoleptic activities of bidara (Zizipus spina CRISTI L.)

- KOMBUCHA DRINK. *Biotik: Jurnal Ilmiah Biologi Teknologi dan Kependidikan*, 10(1), 73-93.
- Taupiqurrohman, O., Rezaldi, F., Fadillah, M. F., Amalia, D., & Suryani, Y. (2022). Anticancer potency of dimethyl 2-(2-hydroxy-2-methoxypropilidene) malonate in kombucha. *Jurnal Biodjati*, 7(1), 86-94.
- Uriev, E., Agostino, M., & Ramsland, P. A. (2011). Challenges and advances in computational docking: 2009 in review. *Journal of Molecular Recognition*, 24(2), 149–164.
- Warren, G. L., Andrews, C. W., Capelli, A. M., Clarke, B., LaLonde, J., Lambert, M. H., ... & Head, M. S. (2006). A critical assessment of docking programs and scoring functions. *Journal of Medicinal Chemistry*, 49(20), 5912–5931
- Wijayanti, W., Noviyanti, R. D., Luthfianto, D., Haryanti, R. S., & Rezaldi, F. (2026). Peran Kader Kesehatan dan Inovasi Olahan Bekatul serta Kombucha Bunga Telang dalam Penanganan Diabetes Mellitus di Desa Dagen, Karanganyar. *Jurnal Medika: Medika*, 5(1), 1010-1018.
- Yanuar, A., Mun'im, A., Lagho, A. B. A., Syahdi, R. R., Rahmat, M., & Suhartanto, H. (2011). Medicinal plants database and three dimensional structure of the chemical compounds from medicinal plants in Indonesia. *arXiv*.