

**EKSPLORASI POTENSI ANTIDIABETES SENYAWA KHAS BUNGA
TELANG (*Clitoria ternatea* (L.)) TERHADAP RESEPTOR PPAR- γ
MELALUI PENAMBATAN MOLEKULER**



SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat pelaksanaan penelitian skripsi untuk mencapai
Derajat Sarjana Farmasi (S.Farm.)**

Oleh:

TITIN SULISTIOWATI

42121054

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS PERADABAN
SEPTEMBER 2025**

PERNYATAAN PENULIS

JUDUL : EKSPLORASI POTENSI ANTIDIABETES SENYAWA
KHAS BUNGA TELANG (*Clitoria ternatea* (L.))
TERHADAP RESEPTOR PPAR- γ MELALUI PENAMBATAN
MOLEKULER
NAMA : TITIN SULISTIOWATI
NIM : 42121054

Saya menyatakan dan bertanggungjawab dengan sebenarnya bahwa Skripsi ini adalah karya saya sendiri kecuali cuplikan dan ringkasan yang masing-masing telah saya jelaskan sumbernya. Jika pada waktu selanjutnya ada pihak lain yang mengkalim bahwa Skripsi ini sebagai karyanya, yang disertai dengan bukti-bukti yang cukup, maka saya bersedia untuk dibatalkan gelar Sarjana Farmasi saya beserta segala hak dan kewajiban yang melekat pada gelar tersebut.

Bumiayu, 31 Agustus 2025

Penulis



TITIN SULISTIOWATI
NIM. 42121054

PENGESAHAN SKRIPSI

JUDUL : EKSPLORASI POTENSI ANTIDIABETES SENYAWA KHAS
BUNGA TELANG (*Clitoria ternatea* (L.)) TERHADAP
RESEPTOR PPAR- γ MELALUI PENAMBATAN
MOLEKULER
NAMA : TITIN SULISTIOWATI
NIM : 42121054

Skripsi ini telah diujikan dan dipertahankan di depan Dewan Penguji pada Sidang Skripsi tanggal 20 Juli 2025. Menurut pandangan kami, Skripsi ini memadai dari segi kualitas untuk tujuan penganugerahan gelar Sarjana Farmasi (S.Farm.)

Bumiayu, 09 Agustus 2025

Nama Penguji:

Tanda tangan

1. apt. Aziez Ismunandar, S.Farm., M.M.
NIDN. 0604018301



2. Eka Trisnawati, M.Pd.
NIDN. 0615068803



3. Syaiful Prayogi, M.Farm.
NIDN. 0602119303



4. Resa Fafela Rosmi, S.Si., M.Sc.
NIDN. 0604059002



Mengetahui,

Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Peradaban



Rizky Near Prasetyono, M.Pd.
NIDN. 0611099101

Ketua Program Studi Farmasi,



Syaiful Prayogi, M.Farm.
NIDN. 0602119303

ABSTRAK

TITIN SULISTIOWATI, 2025 *EKSPLORASI POTENSI ANTIDIABETES SENYAWA KHAS BUNGA TELANG (*Clitoria ternatea* (L.)) TERHADAP RESEPTOR PPAR- γ MELALUI PENAMBATAN MOLEKULER*. SKRIPSI. PROGRAM STUDI FARMASI. UNIVERSITAS PERADABAN. Syaiful Prayogi, M.Farm dan Resa Frafela Rosmi, S.Si., M.Sc.

Diabetes mellitus tipe 2 adalah jenis diabetes yang berkaitan dengan resistensi dan gangguan sekresi insulin akibat kelainan fungsi sel beta pancreas. Bunga telang (*Clitoria ternatea* (L.)) memiliki kandungan senyawa fenolik, flavonoid dan antosianin yang berpotensi sebagai antidiabetes. Salah satu reseptor yang menjadi target pengobatan diabetes adalah PPAR- γ . Tujuan dilakukan penelitian ini adalah untuk menentukan jenis antosianin bunga telang yang memiliki aktivitas terbaik dibandingkan dengan ligan pioglitazone, interaksi yang terbentuk dan analisis profil farmakokinetik serta toksisitasnya. Metode yang digunakan adalah *molecular docking* dengan software Autodock Vina dengan dilakukan 3 kali percobaan untuk memastikan keakuratan hasil. Hasil *docking* menunjukkan senyawa antosianin memiliki energi ikatan lebih rendah dibandingkan pioglitazone. Senyawa terbaik dimiliki oleh senyawa Ternatin A2 ($-10,46 \pm 0,66$ kcal/mol). Senyawa flavonoid lain juga ditemukan pada penelitian ini yang menunjukkan nilai afinitas setara dengan antosianin, yaitu senyawa Quercetin 3-Orutinoside ($-10,56 \pm 0,00$ kcal/mol) dan Kaemferol 3-neohesperidoside sebesar ($-9,70 \pm 0,00$ kcal/mol). Interaksi dominan melibatkan ikatan hidrogen dan hidrofob pada residu Cys285, Arg288 dan Ile341 dan bertindak sebagai agonis parsial. Prediksi ADME menggunakan ADMETlab 2.0 menunjukkan senyawa memiliki profil farmakokinetik yang cukup baik pada aspek metabolisme dan distribusi, namun memiliki tantangan pada aspek absorpsi dan ekskresi. Hasil prediksi toksisitas menggunakan Toxtree juga menunjukkan seluruh senyawa termasuk kategori tinggi, dan dua di antaranya bersifat mutagenik. Seluruh senyawa antosianin memiliki potensi sebagai agonis parsial alami SPPAR γ M khususnya pada senyawa Ternatin A2. Namun, karena ada keterbatasan dalam absorpsi dan ekskresi serta toksisitas, studi lanjutan terkait modifikasi struktur dan eksperimental sangat diperlukan untuk mengkonfirmasi aktivitas biologis dan keamanan senyawa serta mempertimbangkan rute pemberian non-oral.

Kata kunci: *Clitoria ternatea* (L.), PPAR- γ , *molecular docking*, ADME, Toksisitas

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran ALLAH SWT, Tuhan Yang Maha Pengasih dan Penyayang yang telah melimpahkan rahmat-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian dalam rangka penulisan skripsi. Skripsi ini ditulis dengan judul: "EKSPLOKASI POTENSI ANTIDIABETES SENYAWA KHAS BUNGA TELANG (*Clitoria ternatea* (L.)) TERHADAP RESEPTOR PPAR- γ MELALUI PENAMBATAN MOLEKULER"

Pada kesempatan ini, penulis mengucapkan terimakasih yang tidak terhingga kepada sebagai berikut:

1. Dr. Muh. Kadarisman., S.H.,M.Si selaku Rektor Universitas Peradaban
2. Rizky Noor Prasetyono, M.Pd selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Peradaban
3. Syaiful Prayogi, M.Farm selaku Ketua Program Studi Farmasi dan Dosen Pembimbing I yang sudah membimbing dengan baik dari awal hingga akhir.
4. Resa Frafela Rosmi, S.Si.,M.Sc selaku Dosen Pembimbing II yang sudah membimbing, memberikan arahan dan semangat dalam mengerjakan skripsi ini.
5. apt. Aziez Ismunandar, S.Farm., M.M dan Eka Trisnawati, M.Pd selaku Dosen Penguji yang memberikan saran serta masukan berharga.
6. Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si selaku Kepala Laboratorium Farmasi Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Peradaban.

7. Kedua orang tua tercinta, Bapak Nur Syakirin dan Ibu Rukoyah, atas doa, cinta, dan dukungan tanpa henti.
8. Kakak-kakaku tersayang, Ismiatun Munawaroh dan Rosa Septi Pujiawati, atas dukungan moril dan material.
9. Seluruh keluarga besar, khususnya keluarga Bani Sahri, atas doa dan dukungannya.
10. Teman-teman prodi Farmasi angkatan 2021, atas kebersamaan selama menempuh studi.
11. Rekan-rekan seperjuangan: Anita Sofiana Putri, Putri Aulia, Azzahra Risma Ernanda, Listia Ningsih, Mala Aulia Sari dan Nur Afni Sevina yang telah menjadi bagian dari perjalanan skripsi ini.

Akhir kata semoga Allah SWT membalas segala kebaikan semua pihak yang membantu dalam proses penyusunan skripsi ini. Dan semoga tulisan ini bisa menjadi bermanfaat.

Bumiayu, 31 Agustus 2025
Penulis



Titin Sulistiowati
NIM.42121054

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL	ii
PERNYATAAN PENULIS	iii
PERSETUJUAN SKRIPSI	iv
PENGESAHAN SKRIPSI	v
ABSTRACT	vi
ABSTRAK	vii
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	viii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI	x
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiv
DAFTAR LAMPIRAN	xv
DAFTAR ISTILAH	xvi
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	6
C. Tujuan Penelitian	6
D. Manfaat Penelitian	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	8
A. Kajian Pustaka	8
B. Kajian Penelitian Relevan	35
C. Kerangka Pikir	36
D. Hipotesis	37
BAB III METODE PENELITIAN	38
A. Jenis Penelitian	38
B. Tempat dan Waktu Penelitian	38
C. Populasi dan Sampel	38
D. Variabel penelitian	39
E. Definisi Operasional	40
F. Alat dan Bahan	41
G. Cara Kerja	43
H. Alur Penelitian	47
I. Analisis Data	48
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	49
A. Pemodelan dan Optimasi Struktur Senyawa Uji	49
B. Preparasi Reseptor PPAR- γ	52

C. Validasi Metode <i>Docking</i>	54
D. <i>Molecular Docking</i> Senyawa Uji	57
E. Analisis Aturan <i>Lipinski Rule of Five</i>	67
F. Prediksi ADME (Absorpsi, Distribusi, Metabolisme dan Ekskresi).....	72
G. Prediksi Toksisitas.....	82
BAB V PENUTUP	87
A. Simpulan.....	87
B. Saran.....	88
DAFTAR PUSTAKA	89
LAMPIRAN	101

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 2. 1. Jenis Obat Thiazolidinedione	27
Tabel 2. 2. Aplikasi Komputasi.....	30
Tabel 2. 3. Daftar Jenis Ikatan Ligan-Reseptor.....	32
Tabel 2. 4. Kajian Penelitian Relevan.....	35
Tabel 3. 1. Definisi Operasional	40
Tabel 4. 1. Hasil Optimasi Senyawa Uji Menggunakan Pyrx.....	50
Tabel 4. 2. Hasil Validasi Metode Docking Ligan Alami.....	54
Tabel 4. 3. Hasil Energi Ikatan Senyawa Uji dan Ligan Reference.....	58
Tabel 4. 4. Hasil Uji Normalitas antar Senyawa	61
Tabel 4. 5. Hasil Uji T-Test Senyawa dengan Ligan Reference.....	61
Tabel 4. 6. Hasil Interaksi Ikatan Ligan dan Reseptor	63
Tabel 4. 7. Hasil Analisis Aturan Lipinski rule of five.....	67
Tabel 4. 8. Hasil Analisis Absorpsi Menggunakan ADMETlab 2.0.....	72
Tabel 4. 9. Hasil Distribusi Senyawa Uji Menggunakan ADMETlab 2.0.....	76
Tabel 4. 10. Hasil Metabolisme Senyawa Uji Menggunakan ADMETlab 2.0.....	78
Tabel 4. 11. Hasil Ekskresi Senyawa Uji Menggunakan ADMETlab 2.0.....	81
Tabel 4. 12. Hasil Prediksi Toksisitas Menggunakan Toxtree.....	83

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2. 1. Patofisiologi DM Tipe 2.....	10
Gambar 2. 2. Bunga Telang	11
Gambar 2. 3. Struktur Flavonoid dan Subkelompok Flavonoid	15
Gambar 2. 4. Struktur Kimia Antosianin (Flavilium)	16
Gambar 2. 5. Biosintesis Senyawa Ternatin.....	17
Gambar 2. 7. Struktur PPAR- γ	23
Gambar 2. 8. Struktur dan Cara Regulasi Agen PPAR- γ	24
Gambar 2. 9. Mekanisme Kerja Thiazolidinedion	25
Gambar 2. 10. Dua Model Docking Molekuler	28
Gambar 2. 11. Kerangka Pikir Penelitian.....	36
Gambar 3. 1. Struktur 3D Protein Target.....	42
Gambar 3. 2. Alur penelitian.....	47
Gambar 4. 1. Struktur reseptor PPAR- γ	52
Gambar 4. 2. Interaksi Ligan Alami dengan Reseptor PPAR- γ	55
Gambar 4. 3. Hasil Standar Deviasi Energi Ikatan	59
Gambar 4. 4. Visualisasi Senyawa Ternatin A2	64
Gambar 4. 5. Parameter Pelanggaran Aturan Lipinski	69

DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 1. Surat Izin Penelitian.....	101
Lampiran 2. Surat Keterangan Penelitian	102
Lampiran 3. Kartu Penelitian	103
Lampiran 4. Senyawa Uji Bunga Telang dan Hasil Pemodelan Struktur	104
Lampiran 5. Hasil Penambatan Senyawa Uji dengan Reseptor	106
Lampiran 6. Hasil Visualisasi Interaksi Ligan-Reseptor	114
Lampiran 7. Hasil Visualisasi 2D dan 3D Senyawa Uji Bunga Telang.....	115
Lampiran 8. Hasil Prediksi ADME	119
Lampiran 9. Hasil Prediksi Toksisitas	121
Lampiran 10. Dokumentasi Penelitian	123
Lampiran 11. Biodata Penulis	129
Lampiran 12. Keterangan Bebas Plagiasi	130