MOLECULAR DOCKING METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (*Mikania cordata* (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP ENZIM α-GLUKOSIDASE DAN IMPLEMENTASINYA DALAM DESAIN VIDEO PEMBELAJARAN MATA KULIAH KIMIA FARMASI

SKRIPSI

OLEH:
ALDI TOBING
F1061221006

PROGRAM STUDI PENDIDIKAN KIMIA
JURUSAN PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN
UNIVERSITAS TANJUNGPURA
PONTIANAK
2026

MOLECULAR DOCKING METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (*Mikania cordata* (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP ENZIM α-GLUKOSIDASE DAN IMPLEMENTASINYA DALAM DESAIN VIDEO PEMBELAJARAN MATA KULIAH KIMIA FARMASI

SKRIPSI

Diajukan Sebagai Syarat Untuk Memperoleh Gelar Sarjana Jurusan Pendidikan Matematika dan IPA
Program Studi Pendidikan Kimia

OLEH:
ALDI TOBING
F1061221006

PROGRAM STUDI PENDIDIKAN KIMIA
JURUSAN PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN
UNIVERSITAS TANJUNGPURA
PONTIANAK
2026

LEMBAR PENGESAHAN

MOLECULAR DOCKING METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (_Mikania cordata_ (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP ENZIM α-GLUKOSIDASE DAN IMPLEMENTASINYA DALAM DESAIN VIDEO PEMBELAJARAN MATA KULIAH KIMIA FARMASI

ALDI TOBING
F1061221006

Disetujui:

Pembimbing I	Pembimbing II
Prof. Dr. Masriani, M.Si., Apt.	Dr. Ihsanul Arief, M.Sc
NIP. 197105092000032001	NIDN. 1112038801

Disahkan
Dekan FKIP UNTAN

Prof. Dr. Ahmad Yani T, M.Pd.
NIP. 196604011990021001

Lulus tanggal : 11 Maret 2026

LEMBAR PENGESAHAN

MOLECULAR DOCKING METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (_Mikania cordata_ (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP ENZIM α-GLUKOSIDASE DAN IMPLEMENTASINYA DALAM DESAIN VIDEO PEMBELAJARAN MATA KULIAH KIMIA FARMASI

ALDI TOBING

F1061221006

Disetujui Oleh:

Pembimbing I	Pembimbing II
Prof. Dr. Masriani, M.Si., Apt.	Dr. Ihsanul Arief, M.Sc
NIP. 197105092000032001	NIDN. 1112038801

Penguji I	Penguji II
Dr. Andi Hairil Alimuddin, M.Si.	Eni Mayasari, M.Pd.
NIP. 197109202000031002	NIP. 199005182024062001

Mengetahui
Ketua Jurusan Pendidikan Matematika dan IPA

Dr. Kurnia Ningsih, M.Pd.
NIP. 196703191991012001

LEMBAR PENGESAHAN

MOLECULAR DOCKING METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (_Mikania cordata_ (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP ENZIM α-GLUKOSIDASE DAN IMPLEMENTASINYA DALAM DESAIN VIDEO PEMBELAJARAN MATA KULIAH KIMIA FARMASI

ALDI TOBING

F1061221006

Disetujui Oleh:

Pembimbing I	Pembimbing II
Prof. Dr. Masriani, M.Si., Apt.	Dr. Ihsanul Arief, M.Sc
NIP. 197105092000032001	NIDN. 1112038801

Penguji I	Penguji II
Dr. Andi Hairil Alimuddin, M.Si.	Eni Mayasari, M.Pd.
NIP. 197109202000031002	NIP. 199005182024062001

Mengetahui
Ketua Program Studi Pendidikan Kimia

Prof. Erlina, M.Pd., Ph.D
NIP. 197905172006042002

LEMBAR PENGESAHAN

MOLECULAR DOCKING METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (_Mikania cordata_ (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP ENZIM α-GLUKOSIDASE DAN IMPLEMENTASINYA DALAM DESAIN VIDEO PEMBELAJARAN MATA KULIAH KIMIA FARMASI

ALDI TOBING

F1061221006

Disetujui Oleh:

Pembimbing I	Pembimbing II
Masriani	
Prof. Dr. Masriani, M.Si., Apt.	Dr. Ihsanul Arief, M.Sc
NIP. 197105092000032001	NIDN. 1112038801

Mengetahui,

Dekan FKIP UNTAN	Ketua Jurusan PMIPA
Prof. Dr. Ahmad Yani T, M.Pd.	Dr. Kurnia Ningsih, M.Pd.
NIP. 196604011990021001	NIP. 196703191991012001

PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN

Saya yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama	:	Aldi Tobing
Nim	:	F1061221006
Jurusan/Program Studi	:	PMIPA/Pendidikan Kimia

Menyatakan bahwa dengan sebenarnya bahwa proposal yang *"Molecular docking* Metabolit Sekunder Dari Sembung Rambat (*Mikania Cordata* (Burm.F.) B.L.Rob) terhadap Enzim α-Glukosidase dan Implementasinya Dalam Desain Video Pembelajaran Mata Kuliah Kimia Farmasi" isi tulisan ini merupakan hasil karya sendiri, bukan hasil pengambilan tulisan atau pikiran orang lain yang saya klaim sebagai tulisan atau pikiran pribadi, kecuali kutipan-kutipan yang telah dicantumkan sebelumnya.

Apabila dikemudian hari terbukti dan dapat dibuktikan proposal ini hasil jiplakan, saya bersedia menerima sanksi atas perbuatan tersebut.

Pontianak, Rabu 13 April 2026
Yang membuat pernyataan

Aldi Tobing
NIM F1061221006

ABSTRAK

Diabetes melitus merupakan gangguan metabolik kronis yang ditandai oleh hiperglikemia persisten dan tetap menjadi salah satu penyebab utama morbiditas dan mortalitas di seluruh dunia. Meningkatnya minat terhadap terapi berbasis produk alam telah mendorong eksplorasi senyawa-senyawa tumbuhan yang memiliki aktivitas penghambatan α-glukosidase sebagai agen antidiabetes alternatif. Mikania cordata merupakan salah satu tanaman yang diketahui mengandung beragam senyawa bioaktif, namun potensi molekulernya terhadap α-glukosidase belum banyak dijelaskan secara mendalam. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi penghambatan senyawa fitokimia utama dari M. cordata melalui pendekatan *in silico* berupa *molecular docking*, penilaian sifat fisikokimia, dan prediksi farmakokinetik. Hasil *molecular docking* terhadap α-glukosidase (PDB ID: 5ZCC) menunjukkan bahwa beberapa senyawa berinteraksi dengan baik dengan enzim tersebut, dengan Ƭ-Cadinol menunjukkan afinitas pengikatan terkuat (-8,5 kcal/mol), melampaui inhibitor standar *acarbose* (-7,9 kcal/mol). Ƭ-Cadinol juga membentuk dua ikatan hidrogen identik dengan residu katalitik kunci Arg411 dan Gln256, meniru profil interaksi *acarbose* dan mengindikasikan mekanisme inhibisi yang serupa. Evaluasi sifat fisikokimia menunjukkan bahwa Ƭ-Cadinol memenuhi Aturan Lima Lipinski, yang mengindikasikan potensi *drug-likeness* yang baik untuk pemberian oral. Prediksi farmakokinetik mengungkapkan penyerapan usus yang moderat, tidak menghambat jalur metabolik utama, serta laju eliminasi yang dapat diterima. Namun, penilaian toksisitas menunjukkan potensi karsinogenisitas dan hepatotoksisitas, sehingga menyoroti aspek keamanan yang memerlukan validasi lebih lanjut melalui uji *in vitro* dan *in vivo*. Integrasi antara performa *docking*, kemiripan interaksi dengan *acarbose*, dan sifat fisikokimia yang menguntungkan menempatkan Ƭ-Cadinol sebagai kandidat inhibitor α-glukosidase yang menjanjikan. Meskipun demikian, prediksi toksisitasnya menunjukkan perlunya evaluasi eksperimental yang komprehensif sebelum dikembangkan menuju aplikasi terapeutik. Penelitian ini juga menghasilkan desain video pembelajaran sebagai media edukasi pada mata kuliah Kimia Farmasi. Video disusun melalui perekaman layar, penjelasan naratif setiap langkah analisis ADMET dan docking, serta proses penyuntingan

menggunakan *Canva Pro*. Produk berupa prototipe video pembelajaran dirancang untuk membantu mahasiswa memahami keterkaitan struktur molekul, sifat fisikokimia, dan aktivitas biologis melalui pendekatan *in silico*.

Kata Kunci: **Mikania cordata, α-glucosidase, *In silico*, *Molecular docking*, Antidiabetes**

KATA PENGANTAR

Syukur alhamdulillah, penulis panjatkan kepada اللهُ سبحانه وتعالى karena atas rahmat, taufik, serta hidayah-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul berjudul *''Molecular docking* Metabolit Sekunder Dari Sembung Rambat (*Mikania Cordata* (Burm.F.) B.L.Rob) terhadap Enzim α-Glukosidase Dan Implementasinya Dalam Desain Video Pembelajaran Mata Kuliah Kimia Farmasi*''*. Penelitian ini dilatarbelakangi oleh tingginya prevalensi diabetes melitus yang mendorong pencarian kandidat inhibitor α-glukosidase dari bahan alam. Tanaman sembung rambat (*Mikania cordata* (Burm.f.) B.L.Rob) diketahui mengandung berbagai metabolit sekunder yang berpotensi memiliki aktivitas biologis. Melalui pendekatan *in silico* berupa *molecular docking*, penelitian ini bertujuan untuk menganalisis interaksi senyawa metabolit sekunder terhadap enzim α-glukosidase serta mengevaluasi potensi afinitas ikatannya sebagai kandidat antidiabetes. Selain itu, penelitian ini tidak hanya berfokus pada aspek komputasi kimia farmasi, tetapi juga mengintegrasikan hasil penelitian ke dalam pengembangan media pembelajaran berupa desain video yang diharapkan dapat digunakan pada mata kuliah Kimia Farmasi.

Di setiap detik perjalanan ini, penulis merasakan betapa beratnya langkah yang diambil. Terkadang, di balik setiap air mata dan kegagalan, penulis terus berusaha untuk bangkit. Dengan hati yang dipenuhi rasa haru, pada kesempatan ini pula penulis ingin menyampaikan banyak ucapan terima kasih kepada:

1. Prof. Dr. Ahmad Yani T, M.Pd., selaku Dekan Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Tanjungpura.

2. Dr. Kurnia Ningsih, M.Pd., sebagai Ketua Jurusan Pendidikan Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Tanjungpura.
3. Prof. Erlina, M.Pd, Ph.D selaku Ketua Program Studi Pendidikan Kimia Universitas Tanjungpura.
4. Ibu Prof. Dr. Masriani, M.Si,. Apt selaku dosen pembimbing I dan bapak Dr. Ihsanul Arief, M.Sc selaku dosen pembimbing II yang dengan sabar, penuh perhatian, dan kasih sayang memberikan bimbingan, kritik, serta saran yang berharga selama proses ini.
5. Bapak Dr. Andi Hairil, M.Si selaku dosen Penguji I dan Ibu Eni Mayasari, M.Pd selaku dosen Penguji II yang telah memberikan saran serta masukan yang sangat berharga selama proses penyusunan skripsi ini.
6. Orang tua tercinta, Bapak Usmansyah (رَحِمَهُ ٱللَّهُ رَحْمَةً وَاسِعَةً) dan Ibu Halimah serta saudari Desi Ramadhani dan Suci Ramandha serta keluarga besar yang dengan tulus memberikan segala bentuk dukungan, baik moril maupun materil, serta tak pernah lelah mendoakan di setiap sujud mereka. Semua ini adalah bukti cinta yang tidak ternilai.
7. Sahabat dan rekan seperjuangan, Muhammad Rafif, Tery Mardasela, Inna Aulianisa, Dian Oktavianti, Stefany Theresia, Elisse Nur Allfira, Tiana, Septia Vrischika Rajab, Safna Anjani, Amalia Zahra, Rosiana Pitri, Asha Nur Rezqia, Riyan dan Mahasiswa S-1 Pendidikan Kimia 2022
8. Teman-teman penulis sedari bangku SMA, Duittasari yang selalu memberikan semangat dan dukungannya kepada penulis.

9. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu persatu, tetapi telah memberikan kontribusi yang besar dalam menyelesaikan proposal ini.

Penulis menyadari bahwa proposal ini masih jauh dari kata sempurna. Setiap kekurangan adalah pengingat bahwa proses belajar tidak pernah selesai, dan setiap kritik adalah anugerah untuk perbaikan. Semoga segala upaya yang telah dicurahkan dalam penyusunan proposal ini dapat memberikan manfaat, tidak hanya bagi penulis, tetapi juga bagi ilmu pengetahuan dan masyarakat luas. Untuk setiap air mata yang jatuh, untuk setiap doa yang terucap, dan untuk setiap pelajaran yang berharga, semoga semua ini diridhai oleh اللهُ سبحانه وتعالى.

Dengan segala kerendahan hati, penulis persembahkan karya sederhana ini kepada mereka yang menapaki jalan ilmu, yang dalam setiap reaksi, struktur, dan fenomena kimia melihat jejak kebesaran اللهُ سبحانه وتعالى yang Maha Sempurna.

Pontianak, Senin 13 April 2026
Penulis

Aldi Tobing
F1061221006

DAFTAR ISI

ABSTRAK viii

KATA PENGANTAR x

DAFTAR ISI xiii

DAFTAR GAMBAR xvi

DAFTAR TABEL xvii

BAB I PENDAHULUAN 1

A. Latar Belakang 1

B. Rumusan Masalah 5

C. Tujuan Penelitian 6

D. Manfaat Penelitian 6

E. Definisi Operasional 7

1. Antidiabetes 7

2. Inhibitor α-glukosidase 7

3. Metabolit Sekunder *M. cordata* 8

4. *Molecular docking* 9

5. Video Pembelajaran 10

BAB II TINJAUAN PUSTAKA 11

A. Tumbuhan Sembung Rambat (*Mikania cordata*) 11

B. Kandungan Metabolit Sekunder *M. cordata* 13

C. Diabetes Melitus (DM) 16

D. *Acarbose* 17

E. *Molecular docking* 18

F. Video Pembelajaran 24

BAB III METODE PENELITIAN 26
A. Jenis Penelitian 26
B. Waktu dan Tempat 26
C. Variabel Penelitian 26
1. Variabel Bebas 26
2. Variabel Terikat 27
3. Variabel Kontrol 27
D. Alat dan Bahan 27
1. Alat 27
2. Bahan 28
E. Prosedur 28
1. Pengunduhan Makromolekul 28
2. Preparasi Makromolekul 29
3. Preparasi Ligan Asli (*Native Ligand*) 29
4. Prediksi Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Eliminasi dan Toksisitas 30
5. Pengunduhan Struktur 3D Senyawa *M. cordata* 30
6. Pembuatan Struktur 3D Senyawa *M. cordata* 31
7. Preparasi Ligan Uji 31
8. Proses *Molecular docking*. 32
9. Visualisasi Hasil *Docking*. 33
F. Prosedur Pengembangan video pembelajaran. 35
1. Analisis (*Analyze*). 35
2. Desain (*Design*) 36
G. Analisis Data 38

1. Sifat Fisikokimia dan Farmakokinetik 38
2. *Molecular docking* 39
BAB IV PEMBAHASAN 40
A. *Molecular docking* 40
B. Prediksi Sifat Fisikokimia Senyawa Ƭ-Cadinol dari *M. cordata* 52
C. Prediksi Sifat Farmakokinetik Senyawa Ƭ-Cadinol dari *M. cordata* 54
D. Produk Video Pembelajaran 56
1. *Analysis* (Analisis) 57
2. *Design* (Desain) 62
BAB V KESIMPULAN 66
A. Kesimpulan 66
B. Saran 66
DAFTAR PUSTAKA 68
LAMPIRAN 80

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. Tumbuhan sembung rambat. (a) Daun sembung rambat, (b) bunga dan batang sembung rambat..... 12

Gambar 2. Struktur Senyawa dari M. cordata 15

Gambar 3. Struktur *Acarbose* 17

Gambar 4. Cara Kerja *Acarbose* Dalam Sistem Pencernaan..... 18

Gambar 5. Skema Kerja Proses *Molecular docking* Secara Sistematis Prediksi ADME, dan Toksisitas. 34

Gambar 6. Interaksi ikatan hidrogen antara ligan dan residu kunci di dalam kantong pengikatan reseptor α-glukosidase. 49

Gambar 7. QR Code untuk mengakses video yang telah dirancang 65

DAFTAR TABEL

Tabel 1. *Storyboard* Video Pembelajaran Mata Kuliah Kimia Farmasi 37

Tabel 2. Perbandingan Energi Ikatan Hasil Docking antara Senyawa-Senyawa dari M. cordata dan Akarbosa. 41

Tabel 3. Profil Interaksi Asam Amino pada Situs Aktif antara Ligan uji dan Protein Target α-glukosidase. 44

Tabel 4. Prediksi Karakteristik Fisikokimia dan Kelayakan Obat dari Senyawa uji dari *M. cordata* 53

Tabel 5. Prediksi Farmakokinetik Berbasis ADMET senyawa *M. cordata* 55

Tabel 6. Analisis Kesulitan Mahasiswa dalam Memahami Sifat Fisikokimia dan Farmakokinetik Senyawa 59

Tabel 7. Hasil Desain Video Pembelajaran 63

LAMPIRAN

Lampiran 1. Hasil Produk Video Pembelajaran 80

Lampiran 2. Hasil Survei Kebutuhan Media Pembelajaran 80

Lampiran 3. Bukti Submit Artikel Ilmiah di Jurnal Terakreditasi SINTA 82

Lampiran 4. SK Pembimbing Penyusunan Skripsi 83

Lampiran 5. SK Pembimbing Penyusunan Artikel 84

Lampiran 6. Undangan Ujian Skripsi 85

Lampiran 7. Berita Acara Ujian Skripsi 86

Lampiran 8. Luaran Penelitian 87

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Diabetes Mellitus (DM) merupakan penyakit tidak menular yang ditandai oleh gangguan metabolik yang melibatkan protein, lipid, dan karbohidrat (Gao et al., 2025), gangguan utama metabolisme karbohidrat pada DM ditandai hiperglikemia yang terjadi akibat defisiensi insulin atau resistensi insulin (Galicia-Garcia et al., 2020). Hiperglikemia persisten memiliki dampak fisiologis yang luas dan dapat memicu berbagai komplikasi yang memengaruhi hampir seluruh sistem organ (Satyam Mishra et al., 2024). Peningkatan jumlah penderita diabetes yang terus-menerus telah berkembang menjadi masalah kesehatan global yang serius. Menurut International Diabetes Federation (IDF) (2025), diperkirakan sebanyak 589 juta orang dewasa di seluruh dunia hidup dengan diabetes pada tahun 2024, dan jumlah ini diproyeksikan meningkat menjadi 853 juta pada tahun 2050. Secara global, Indonesia menempati peringkat kelima, dengan sekitar 20,4 juta orang dewasa terdampak dan prevalensi sebesar 11%. Peningkatan prevalensi diabetes yang mengkhawatirkan ini, menciptakan kebutuhan mendesak untuk pengembangan intervensi terapeutik yang lebih baru dan efektif, tidak hanya karena prevalensinya yang tinggi, tetapi juga karena komplikasi jangka panjang yang ditimbulkannya, termasuk nefropati, neuropati, retinopati, dan penyakit kardiovaskular (Aikaeli et al., 2022), serta peningkatan risiko peradangan kronis, stres oksidatif, dan disfungsi mitokondria (Blagov et al., 2024; Masenga et al., 2023).

Pengontrolan kadar glukosa darah dengan antidiabets oral yang memiliki mekanisme penghambatan enzim α-glukosidase merupakan salah satu terapi farmakologi untuk menangani DM. Enzim α-glukosidase adalah

enzim yang menghidrolisis ikatan 1,4-α-glukopiranosidik dari oligosakarida dan disakarida menjadi glukosa (Liu et al., 2021). Inhibitor α-glukosidase seperti *acarbose* bekerja dengan menghambat aktivitas enzim α-glukosidase untuk menghalangi proses pemecahan karbohidrat sehingga menunda penyerapan glukosa di dalam usus dan membantu mengontrol kenaikan kadar glukosa darah (hiperglikemia) (Yuniarto & Selifiana, 2018). Meskipun *acarbose* dinilai efektif dalam mengontrol hiperglikemia, namun penggunaan jangka panjang dapat mengakibatkan kembung, mual, dispepsia, iritasi lambung, dan diare (Febriyanti et al., 2024). Selain itu, inhibitor α-glukosidase yang umum digunakan juga dilaporkan terkait dengan efek samping hepatotoksik yang jarang terjadi. Efektivitas obat-obatan ini juga relatif rendah, dengan nilai IC_{50} yang tinggi (Proença et al., 2017). Oleh karena itu, perlu upaya pencarian obat diabetes yang lebih efektif dengan efek samping yang rendah. WHO telah merekomendasikan penggunaan tanaman obat tradisional untuk pengobatan diabetes karena dinilai efektif, tidak toksik, minim efek samping, dan relatif murah, (Nisha et al., 2018). Salah satu tumbuhan yang berpotensi sebagai antidiabetes adalah *M. cordata.*

Mikania cordata atau sering disebut sembung rambat merupakan salah satu spesies dari tumbuhan famili *Asteraceae* yang berpotensi sebagai antidiabetes. Secara tradisional, tumbuhan ini telah digunakan untuk mengatasi berbagai macam penyakit. Daun sembung rambat telah digunakan untuk mengatasi gangguan pencernaan, disentri, luka (Siddiqui et al., 2018), borok, sakit perut, kudis, gatal-gatal dan penyakit kulit lainnya (Perawati et al., 2020). Akar *M. cordata* juga telah digunakan untuk pengobatan batuk, pegal linu serta

masuk angin (Zuhroidah et al., 2023). Hasil penelitian sebelumnya menunjukkan bahwa sembung rambat memiliki berbagai aktivitas biologis seperti antimikroba, antivirus, antiinflamasi, antispasmodik, antitumor, antikoagulan, bronkodilator (Rufatto et al., 2012 dan Zanzabil et al., 2023), antioksidan (Inawati, 2014), antinyeri (Ahmed et al., 2001), dan antidiabetes (Jayatilake & Munasinghe, 2020). Senyawa kimia yang telah dilaporkan dari tumbuhan *M. cordata* oleh Sajid et al. (2019) adalah friedelin, stigmasterol, sesquiterpene lactone, sterol, α-thujene, β-thujene, limonene, linalol , α-terpineol, δ-elemene , β-elemene, α-humulene, γ-murolene, germacrene D, bicyclogermacrene, α-muuroolene, mikanolide, dihydromikanolide, germacrene A, germacrene B, germacrene D-4-ol, α-cadinol, scandenolide (sesquiterpene lactone), scandenolide, germacranolide, cordatolide, γ-cadinene, cis-calamenene, δ-cadinene 6α-hydroxycordatolide, mikanin, dan epifridelanol. Singh et al. (2022) juga melaporkan keberadaan deoxymikanolide, α-pienene, β-pienene, sedangkan Siddiqui et al. (2019) mengidentifikasi 16-hydroxy betulinic acid (Siddiqui et al., 2019) pada *M. cordata.*

Penemuan dan pengembangan obat baru, khususnya obat dari tumbuhan merupakan proses yang panjang, kompleks, mahal, dan berisiko, mulai dari identifikasi kandidat obat, validasi kandidat, penilaian farmakokinetik, dan toksisitas praklinis. Penggunaan metode komputasional melalui molekuler docking dapat mengatasi masalah tersebut. Data yang dihasilkan dari *molecular docking* dapat digunakan untuk menyaring senyawa yang yang akan dilanjutkan ke tahap uji *in vitro* dan *in vivo*. Metode ini dapat

membantu mengidentifikasi dan memprediksi interaksi antara ligan dengan reseptor target (Shaker et al., 2021), sehingga dapat memprediksi potensi aktivitas biologis suatu senyawa berdasarkan nilai afinitas pengikatan dan stabilitas kompleks ligan dengan reseptor. Uji *in silico* memiliki beberapa keuntungan diantaranya kecepatan dan tingkat akurasi yang tinggi (Jannah, 2020), waktu yang singkat, dan murah (Makatita et al., 2020). Dengan demikian, peluang keberhasilan di tahap *in vitro* dan *in vivo* dapat ditingkatkan (Shaker et al., 2021).

Penelitian ini akan mengkaji potensi antidiabetes secara *in silico* terhadap 36 metabolit sekunder *M. cordata* yang telah diidentifikasi oleh peneliti sebelumnya dengan protein target enzim α-glukosidase (PDB ID: 3W37). Hasil penelitian ini selanjutnya akan dimanfaatkan untuk pengembangan media video pembelajaran pada mata kuliah Kimia Farmasi. Berdasarkan hasil wawancara dengan dosen pengampu mata kuliah Kimia Farmasi, diketahui bahwa materi tentang hubungan struktur, sifat kimia fisika, ikatan kimia dengan proses ADME obat dan aktivitas biologi obat, secara kualitatif dan kuantitatif (CPMK 1).

Berdasarkan hasil survei terhadap 19 mahasiswa Pendidikan Kimia angkatan 2022, sebanyak 89,47% responden menyatakan mengalami kesulitan dalam membaca dan memahami hasil analisis ADMET (**Lampiran 2**). Permasalahan ini terutama berkaitan dengan interpretasi data numerik dan klasifikasi parameter yang dihasilkan oleh tools seperti ADMETlab 3.0. Kesulitan ini muncul karena hasil analisis umumnya berupa angka-angka, skor, dan istilah teknis (Caco-2, BBB, Log P, VDss, LD_{50}, dan klasifikasi toksisitas)

yang bersifat abstrak dan tidak langsung dapat dipahami maknanya tanpa konteks atau penjelasan tambahan tentang batas normal dan konsekuensinya terhadap penyerapan atau distribusi obat. Dalam konteks tersebut, video pembelajaran berbasis analisis data menjadi media yang sesuai dengan kebutuhan mahasiswa. Hasil survei menunjukkan 95,75% mahasiswa menyatakan perlunya media yang menjelaskan secara spesifik cara membaca dan menafsirkan hasil analisis ADMET dari ADMETlab 3.0. Video memungkinkan penjelasan langkah demi langkah terhadap setiap parameter serta dapat digunakan secara berulang sesuai kecepatan belajar mahasiswa (Cantika, 2022; Rofiqodduri & Wahyuningsih, 2023). Meskipun telah tersedia video tentang ADMET, sebagian besar hanya membahas konsep teoretis dan belum berfokus pada interpretasi hasil numerik dan klasifikasi prediktif. Oleh karena itu, penelitian ini mengembangkan video pembelajaran yang berfokus pada analisis fisikokimia, farmakokinetik, dan toksisitas senyawa alami sebagai kandidat obat.

B. Rumusan Masalah

1. Bagaimana aktivitas senyawa metabolit sekunder dari *M. cordata* terhadap penghambatan enzim α-glukosidase melalui uji secara *in silico*?
2. Bagaimana karakteristik farmakokinetik senyawa metabolit sekunder dari *M. cordata*?
3. Bagaiamana toksisitas senyawa metabolit sekunder dari *M. cordata*?
4. Bagaimana desain video pembelajaran analisis sifat fisikokimia, farmakokinetik, dan toksisitas senyawa alami sebagai kandidat obat pada mata kuliah Kimia Farmasi?

C. Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk:

1. Mengkaji aktivitas metabolit sekunder dari mikania cordata terhadap penghambatan enzim α-glukosidase secara *in silico*.
2. Mengkaji karakteristik farmakokinetik senyawa metabolit sekunder dari *M. cordata*.
3. Mengidentifikasi toksisitas senyawa metabolit sekunder dari *M. cordata*.
4. Membuat desain video analisis fisikokimia, farmakokinetik, dan toksisitas senyawa alami sebagai kandidat obat.

D. Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini adalah untuk:

1. Menjadi sumber informasi ilmiah mengenai potensi antidiabetes dari Sembung Rambat (*M. cordata*) ditinjau dari uji *In silico,* interaksi reseptor α-glukosidase dengan senyawa metabolit sekunder *M. cordata*.
2. Menjadi referensi sebagai sumber ilmu pengetahuan dalam bidang ilmu kimia dan ilmu kesehatan, untuk penelitian selanjutnya dalam penemuan dan pengembangan senyawa antidiabetes baru.
3. Menjadi sumber bahan atau media pembelajaran sains bagi mahasiswa pada mata kuliah Kimia Farmasi yang dikembangkan dalam bentuk video pembelajaran.

E. Definisi Operasional

Berdasarkan proposal penelitian yang telah dirancang, maka diperlukan adanya definisi operasional untuk memberikan batasan bagi peneliti. Adapun batasan-batasan tersebut di antaranya sebagai berikut:

1. Antidiabetes

Diabetes Melitus (DM) adalah penyakit yang ditandai dengan terjadinya (hiperglikemia) akibat daripada gangguan metabolisme baik itu dari karbohidrat, lemak dan protein. Gangguan ini berhubungan dengan kurangnya kinerja pangkreas dalam menghasilkan insulin atau ketidakmampuan tubuh dalam menggunakan insulin (Rahmasari & Wahyuni, 2019). Pengontrolan gula darah dianggap sebagai strategi utama dalam mengobati diabates dan mengurangi komplikasi diabates. Umumnya, pengobatan paling umum untuk diabates adalah dengan menghambat aktivitas enzim α-glukosidase menggunakan obat sintesis seperti *acarbose*. Meskipun dinilai efektif dalam mencegah hiperglikemia, tetapi memiliki efek samping dalam jangka panjang yang merupakan hasil yang tidak di inginkan dari setiap penderita diabates (Adiputra et al., 2023). Antidiabetes yang dimaksud diatas penelitian ini adalah antidiabetes dari metabolit sekunder *M. cordata*.

2. Inhibitor α-glukosidase

Inhibitor α-glukosidase adalah senyawa yang dapat menghambat aktivitas enzim α-glukosidase dalam proses pencernaan karnohidrat menjadi glukosa. Enzim α-glukosidase adalah enzim yang berkerja untuk hidrolase

karbohidrat utama yang mengatur glukosa darah, enzim ini menghidrolisis ikatan 1,4-α-glukopiranosidik dari oligosakarida dan disakarida menjadi glukosa. Oleh karena itu, bahwa penghambatan aktivitas α-glukosidase dapat menghambat penyerapan glukosa dan menurunkan kadar glukosa darah postprandial (Liu et al., 2021). Adapun inhibitor α-glukosidase yang dimaksud dalam penelitian ini adalah senyawa dari tumbuhan *M. cordata* yang dapat menghambat aktivitas enzim α-glukosidase dengan *acarbose* sebagai pembanding menggunakan metode uji secara *in silico*.

3. Metabolit Sekunder *M. cordata*

Metabolit sekunder merupakan kandungan senyawa yang diproduksi oleh tanaman dalam bentuk yang tidak sama antara spesies satu dengan yang lainnya, metabolit sekunder ini digunakan sebagai bentuk perlindungan diri terhadap gangguan dari organisme lain maupun lingkungan yang terbentuk melalui proses metabolisme sekunder. Senyawa metabolit sekunder yaitu flavonoid, alkaloid, fenolik, saponin, tanin, saponin, steroid, terpenoid (Pangisian et al., 2022). *M. cordata* ini mempunyai metobolit sekunder dari beberapa jenis metabolit sekunder diantaranya steroid, alkaloid, saponin, dilakton, diterpen, monoterpan, seskuiterpene, dan senyawa flavonoid dan menunjukkan aktivitas antioksidan (Inawati, 2014). Metabolit sekunder yang dimaksud dalam penelitian ini adalah metabolit sekunder yang berasal dari tumbuhan *M. cordata.* Senyawa kimia dari tumbuhan *M. cordata* yang telah berhasil di isolasi dan dilaporkan diantaranya, friedelin, stigmasterol, sesquiterpene lactone, sterol, α-thujene, β-thujene, limonene, linalol , α-terpineol, δ-elemene , β-elemene, α-humulene, γ-murolene, germacrene D,

bicyclogermacrene, α-muuroolene, mikanolide, dihydromikanolide, germacrene A, germacrene B, germacrene D-4-ol, α-cadinol, scandenolide (sesquiterpene lactone), scandenolide, germacranolide, cordatolide, γ-cadinene, cis-calamenene, δ-cadinene 6α-hydroxycordatolide, mikanin, epifridelanol (Sajid et al., 2019). deoxymikanolide, α-pienene, β-pienene (Singh et al., 2022). 16-hydroxy betulinic acid (Siddiqui et al., 2019).

4. *Molecular docking*

Molecular docking merupakan simulasi berbasis komputer yang digunakan memprediksi inetrraksi antara ligan (molekul calon obat) dengan reseptor (protein target) pada sisi aktifnya. Metode ini dapat memprediksi afinitas dan potensi aktivitas dari ligan sebagai kandidat obat dengan menganalisis bentuk 3D dari senyawa yang terikat pada sisi aktif dari reseptor (Pratama et al., 2017). *Molecular docking* yang dimaksud dalam penelitian ini digunakan untuk memprediksi interaksi antara protein target (reseptor α-glukosidase) dengan senyawa metabolit sekunder dari tumbuhan *M. cordata* yang dapat diunduh pada *website* https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/, jika senyawa dari *M. cordata* belum dilaporkan pada *website pubchem* maka dapat dibuat menggunakan *software* Avogadro. Selanjutnya Chimera 1.16 untuk preparasi reseptor α-glukosidase dan senyawa metabolit sekunder dari tumbuhan *M. Cordata* dengan pembanding *acarbose*, *PyRx* 0.8 untuk analisis *docking* dan *Discovery Studio Visualizer* v21.1.0.20298 untuk melihat terutama mengevaluasi interaksi yang terjadi diantaranya interaksi hidrofobik, ikatan hidrogen, *Van der Wals* dan harus memenuhi aturan *Lipinski's Rule of Five*

dalam penghambatan α-glukosidase yang baik dan dibandingkan dengan *acarbose*. Reseptor yang digunakan dalam analisis *molecular docking* diperoleh dari *Protein Data Bank* (PDB) yang dapat diakses melalui *website* https://www.rcsb.org/ reseptor yang digunakan yaitu α-glukosidase. Metode *docking* dikatakan baik yaitu ketika nilai RMSD yang dihasilkan ≤2 Å. Prediksi ADMET (Absorbsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi dan Toksisitas) menggunakan *website* (https://admetlab3.scbdd.com/).

5. Video Pembelajaran

Video merupakan metode atau gambaran dalam memproyeksikan suatu kegiatan yang berisi materi atau prosedur melakukan sesuatu dalam format gambar bergerak yang dilengkapi dengan suara (Gumelar & Sudarwanto, 2020). Video pembelajaran yang dimaksud dalam penelitian ini adalah video yang berisi tutorial dan materi tentang analisis fisikokimia, farmakokinetik, dan toksisitas senyawa alami sebagai kandidat obat. Video ini dirancang sebagai media dalam pembelajaran pada mata kuliah Kimia Farmasi khusunya pada materi hubungan struktur dan aktivitas biologis. Video pembelajaran dikembangkan menggunakan model ADDIE (*Analyze, Design, Develop, Implement, and Evaluate*). Namun, dalam penelitian ini, proses pengembangan video hanya dilakukan sampai tahap desain (perancangan).