



Department of Digital Business

Journal of Artificial Intelligence and Digital Business (RIGGS)

Homepage: <https://journal.ilmudata.co.id/index.php/RIGGS>

Vol. 5 No. 2 (2026) pp: 9447-9454

P-ISSN: 2963-9298, e-ISSN: 2963-914X

Computational Study of *Ocimum Basilicum* Bioactive Compounds Against Diabetes Mellitus

Rabiha Nur Shadrina, Rahma Septiani, Eksa Alinda, Nia Paramita, Rosmala, Himyatul Hidayah

Fakultas Farmasi, Universitas Buana Perjuangan Karawang, Jawa Barat, Indonesia

fm24.rabihashadrina@mhs.ubpkarawang.ac.id, fm24.rahmaseptiani@mhs.ubpkarawang.ac.id,

fm24.eksaalinda@mhs.ubpkarawang.ac.id, fm24.niaparamita@mhs.ubpkarawang.ac.id,

fm24.rosmala@mhs.ubpkarawang.ac.id, himyatul.hidayah@ubpkarawang.ac.id

Abstrak

Diabetes melitus merupakan penyakit metabolik kronis akibat gangguan sekresi atau kerja insulin dengan prevalensi global yang terus meningkat. Pengobatan konvensional seperti metformin memiliki keterbatasan akibat efek samping penggunaan jangka panjang, sehingga mendorong eksplorasi kandidat antidiabetes berbasis bahan alam. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan senyawa bioaktif *Ocimum basilicum* yang memenuhi standar toksisitas dan farmakokinetik, mengidentifikasi interaksi yang terjadi, serta menentukan senyawa dengan afinitas paling kuat terhadap reseptor Glycogen Synthase Kinase-3 Beta (GSK-3 β) secara *in silico*. Metode yang digunakan meliputi skrining toksisitas dan farmakokinetik (ADME) melalui pkCSM, uji Lipinski's Rule of Five melalui SwissADME, serta molecular docking menggunakan AutoDock Tools dan PyRx terhadap reseptor GSK-3 β (PDB ID: 4PTE) dengan validasi menghasilkan RMSD 1,59 Å. Dari 30 senyawa yang diuji, 13 senyawa memenuhi seluruh parameter toksisitas, farmakokinetik, dan Lipinski's Rule of Five. Hasil molecular docking menunjukkan bahwa Salvigenin memiliki nilai binding affinity terbaik sebesar -7,57 kkal/mol dengan Ki 2,82 μ M, melampaui metformin (-4,13 kkal/mol) dan mendekati ligan alami (-7,51 kkal/mol). Visualisasi interaksi menunjukkan Salvigenin membentuk ikatan hidrogen dengan residu VAL 135 yang juga terbentuk pada ligan alami dan metformin, serta interaksi hidrofobik pada beberapa residu yang serupa dengan ligan alami. Salvigenin diprediksi memiliki potensi paling baik sebagai kandidat antidiabetes dari *Ocimum basilicum* yang bekerja melalui mekanisme penghambatan reseptor GSK-3 β .

Kata kunci: *Ocimum basilicum*, Diabetes Melitus, Molecular Docking, GSK-3 β , Salvigenin

1. Latar Belakang

Diabetes melitus merupakan salah satu penyakit tidak menular yang menjadi tantangan besar dalam bidang kesehatan global karena prevalensinya terus mengalami peningkatan dari tahun ke tahun. Penyakit ini ditandai dengan kondisi hiperglikemia kronis yang terjadi akibat gangguan sekresi insulin, kerja insulin, maupun kombinasi dari keduanya. Hiperglikemia yang berlangsung dalam jangka panjang dapat menyebabkan berbagai komplikasi serius, baik pada pembuluh darah kecil maupun pembuluh darah besar. Komplikasi tersebut meliputi retinopati diabetik, nefropati diabetik, neuropati, penyakit jantung koroner, stroke, hingga gangguan sirkulasi perifer yang dapat berujung pada amputasi. Tingginya angka kejadian dan komplikasi yang ditimbulkan menjadikan diabetes melitus sebagai salah satu penyebab utama penurunan kualitas hidup dan meningkatnya beban ekonomi masyarakat di berbagai negara.

Menurut International Diabetes Federation (IDF), sebanyak 537 juta orang dewasa berusia 20–79 tahun hidup dengan diabetes pada tahun 2021 dan jumlah tersebut diperkirakan meningkat menjadi 783 juta orang pada tahun 2045 (Sun et al., 2022). Data tersebut menunjukkan bahwa diabetes melitus telah berkembang menjadi masalah kesehatan yang sangat serius di tingkat global. Peningkatan prevalensi diabetes dipengaruhi oleh berbagai faktor, seperti perubahan pola hidup, konsumsi makanan tinggi kalori, rendahnya aktivitas fisik, obesitas, serta peningkatan usia harapan hidup masyarakat. Selain itu, diabetes menjadi salah satu penyebab utama kematian dan kecacatan di berbagai negara, terutama negara berkembang yang masih menghadapi keterbatasan dalam akses layanan kesehatan dan pengendalian penyakit kronis (WHO, 2023). Kondisi ini menunjukkan bahwa upaya pencegahan dan pengembangan terapi yang efektif untuk diabetes melitus masih menjadi kebutuhan yang sangat penting.

Pengelolaan diabetes melitus umumnya dilakukan melalui kombinasi modifikasi gaya hidup dan terapi farmakologis. Modifikasi gaya hidup mencakup pengaturan pola makan, peningkatan aktivitas fisik, pengendalian berat badan, serta edukasi kesehatan yang berkelanjutan. Di sisi lain, terapi farmakologis diperlukan untuk membantu mengontrol kadar glukosa darah agar tetap berada dalam rentang normal. Metformin hingga saat ini masih menjadi terapi lini pertama dalam pengobatan diabetes melitus tipe 2 karena memiliki efektivitas yang baik dalam meningkatkan sensitivitas insulin serta menurunkan produksi glukosa di hati (American Diabetes Association, 2024). Obat ini juga relatif aman dan memiliki biaya yang lebih terjangkau dibandingkan beberapa terapi antidiabetes lainnya.

Meskipun demikian, penggunaan metformin dalam jangka panjang tidak terlepas dari berbagai keterbatasan. Beberapa pasien mengalami efek samping berupa gangguan gastrointestinal seperti mual, diare, kembung, dan ketidaknyamanan pada saluran pencernaan. Selain itu, penggunaan metformin dalam waktu lama juga dikaitkan dengan risiko terjadinya defisiensi vitamin B12 yang dapat memengaruhi fungsi neurologis pasien (Yazidi et al., 2024). Tidak hanya metformin, beberapa golongan obat antidiabetes lainnya seperti sulfonilurea dan insulin juga diketahui dapat meningkatkan risiko hipoglikemia serta menyebabkan peningkatan berat badan pada sebagian pasien. Variasi respons terapi antarindividu juga menjadi tantangan tersendiri dalam pengelolaan diabetes melitus (Davies et al., 2022). Oleh karena itu, diperlukan upaya berkelanjutan untuk menemukan kandidat obat baru yang memiliki efektivitas tinggi, keamanan yang lebih baik, serta mampu memberikan manfaat terapeutik yang optimal.

Salah satu pendekatan yang banyak dikembangkan dalam pencarian kandidat obat baru adalah pemanfaatan bahan alam. Indonesia dikenal sebagai negara yang memiliki keanekaragaman hayati yang sangat tinggi dan menyimpan berbagai sumber senyawa bioaktif yang berpotensi dikembangkan sebagai obat. Tanaman obat telah lama digunakan secara tradisional oleh masyarakat untuk mengatasi berbagai penyakit, termasuk diabetes melitus. Penggunaan bahan alam dinilai memiliki beberapa keunggulan, seperti ketersediaan yang melimpah, biaya yang relatif lebih rendah, serta kandungan metabolit sekunder yang beragam dan berpotensi memberikan efek farmakologis yang sinergis.

Salah satu tanaman yang menarik perhatian untuk dikaji lebih lanjut adalah kemangi (*Ocimum basilicum* L.). Tanaman ini dikenal luas sebagai bahan pangan maupun tanaman herbal yang mudah ditemukan di berbagai wilayah. Selain digunakan sebagai lalapan dan bahan penyedap makanan, kemangi juga memiliki berbagai aktivitas farmakologis yang telah dilaporkan dalam berbagai penelitian. Fardhani dan Graciella (2023) melaporkan bahwa kemangi berpotensi membantu regenerasi sel β pankreas, meningkatkan sekresi insulin, serta menurunkan kadar glukosa darah. Aktivitas tersebut menunjukkan bahwa kemangi memiliki prospek yang menjanjikan sebagai sumber kandidat senyawa antidiabetes alami.

Selain memiliki efek antihiperglikemik, kemangi juga diketahui mempunyai aktivitas antioksidan yang kuat. Stres oksidatif merupakan salah satu faktor penting yang berperan dalam perkembangan dan komplikasi diabetes melitus. Kondisi hiperglikemia kronis dapat meningkatkan produksi radikal bebas yang menyebabkan kerusakan sel dan jaringan tubuh. Aktivitas antioksidan pada kemangi berperan dalam menetralkan radikal bebas, memperbaiki metabolisme glukosa, serta membantu melindungi sel β pankreas dari kerusakan oksidatif (Arista et al., 2024). Dengan demikian, pemanfaatan kemangi tidak hanya berpotensi menurunkan kadar glukosa darah, tetapi juga membantu mengurangi dampak patologis yang ditimbulkan oleh diabetes melitus.

Potensi farmakologis kemangi tidak terlepas dari kandungan metabolit sekundernya yang sangat beragam. Analisis fitokimia menunjukkan bahwa kemangi mengandung berbagai kelompok senyawa bioaktif seperti flavonoid, senyawa fenolik, antosianin, triterpenoid, dan minyak atsiri yang memiliki aktivitas biologis penting (Zhakipbekov et al., 2024). Keberadaan metabolit sekunder tersebut memberikan kontribusi terhadap berbagai efek terapeutik yang dimiliki oleh tanaman kemangi. Beberapa senyawa bioaktif yang telah berhasil diidentifikasi antara lain acacetin, nevodensin, salvigenin, ladanein, nepetoidin A, caffeic acid, p-coumaric acid, dan cyanidin. Senyawa-senyawa tersebut diketahui memiliki aktivitas antioksidan, antiinflamasi, serta antihiperglikemik yang berpotensi mendukung pengelolaan diabetes melitus (Elansary et al., 2020).

Meskipun berbagai penelitian telah melaporkan aktivitas biologis kemangi, mekanisme molekuler yang mendasari potensi antidiabetes dari senyawa-senyawa tersebut masih perlu dikaji lebih lanjut. Evaluasi terhadap target protein yang berperan dalam regulasi metabolisme glukosa menjadi langkah penting dalam pengembangan kandidat obat antidiabetes. Pendekatan ini memungkinkan identifikasi senyawa yang memiliki kemampuan berinteraksi secara spesifik dengan protein target sehingga dapat memberikan efek terapeutik yang lebih optimal.

Salah satu target molekuler yang saat ini banyak diteliti dalam pengembangan terapi diabetes melitus adalah Glycogen Synthase Kinase-3 Beta (GSK-3 β). Protein ini merupakan enzim serin/treonin kinase yang berperan penting dalam jalur pensinyalan insulin dan pengaturan metabolisme glukosa. Aktivitas GSK-3 β yang berlebihan dapat menghambat kerja glycogen synthase sehingga menurunkan sintesis glikogen dan berkontribusi terhadap terjadinya resistensi insulin. Resistensi insulin merupakan salah satu karakteristik utama diabetes melitus tipe 2 yang menyebabkan penurunan kemampuan sel dalam merespons insulin secara efektif. Oleh karena itu, penghambatan aktivitas GSK-3 β dianggap sebagai strategi yang menjanjikan dalam pengembangan terapi diabetes melitus tipe 2 karena dapat meningkatkan sensitivitas insulin dan memperbaiki homeostasis glukosa (Teli & Gajjar, 2023).

Seiring berkembangnya ilmu pengetahuan dan teknologi, proses penemuan obat kini dapat dilakukan dengan memanfaatkan pendekatan komputasi atau metode *in silico*. Metode ini menawarkan berbagai keuntungan dibandingkan pendekatan konvensional karena lebih cepat, efisien, dan ekonomis dalam proses penyaringan awal kandidat senyawa. Salah satu teknik yang paling banyak digunakan adalah molecular docking. Metode molecular docking memungkinkan prediksi afinitas pengikatan dan pola interaksi antara senyawa kandidat dengan protein target pada tingkat molekuler (Ma et al., 2024). Informasi yang diperoleh dari molecular docking dapat digunakan untuk mengidentifikasi senyawa yang memiliki potensi biologis tinggi sebelum dilakukan pengujian lebih lanjut melalui metode *in vitro* maupun *in vivo* (Agu et al., 2023).

Berdasarkan uraian tersebut, kemangi (*Ocimum basilicum* L.) memiliki potensi besar sebagai sumber senyawa bioaktif yang dapat dikembangkan sebagai kandidat antidiabetes. Kandungan metabolit sekundernya yang beragam, aktivitas antihiperglikemik dan antioksidan yang telah dilaporkan, serta peluang untuk menargetkan protein GSK-3 β menjadikan tanaman ini layak untuk diteliti lebih lanjut. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi senyawa bioaktif kemangi (*Ocimum basilicum* L.) sebagai kandidat antidiabetes melalui molecular docking terhadap reseptor GSK-3 β (PDB ID: 4PTE). Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi awal mengenai afinitas pengikatan dan pola interaksi senyawa bioaktif kemangi terhadap target GSK-3 β , sehingga dapat menjadi dasar bagi penelitian lanjutan dalam pengembangan obat antidiabetes berbasis bahan alam yang lebih efektif dan aman.

2. Metode Penelitian

Penelitian ini merupakan penelitian *in silico* menggunakan metode molecular docking untuk menganalisis potensi senyawa bioaktif dari *Ocimum basilicum* sebagai kandidat antidiabetes terhadap protein target Glycogen Synthase Kinase-3 Beta (GSK-3 β). Penelitian dilakukan menggunakan laptop Asus Vivobook 14 dengan sistem operasi Windows 11, prosesor Intel® Core™ i5, dan RAM 16 GB. Struktur protein target GSK-3 β (PDB ID: 4PTE) diperoleh dari Protein Data Bank (<https://www.rcsb.org>). Senyawa uji diperoleh dari basis data PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>), kemudian struktur ligan disiapkan menggunakan MarvinSketch dan disimpan dalam format .mol2 dan .mrv sebelum dilakukan tahap preparasi lebih lanjut. Protein dan ligan dipreparasi menggunakan AutoDock Tools dengan penambahan atom hidrogen polar, pengaturan muatan, serta pemisahan ligan alami dari reseptor. Validasi metode dilakukan melalui proses redocking dengan kriteria nilai RMSD ≤ 2 Å (Nursanti et al., 2022).

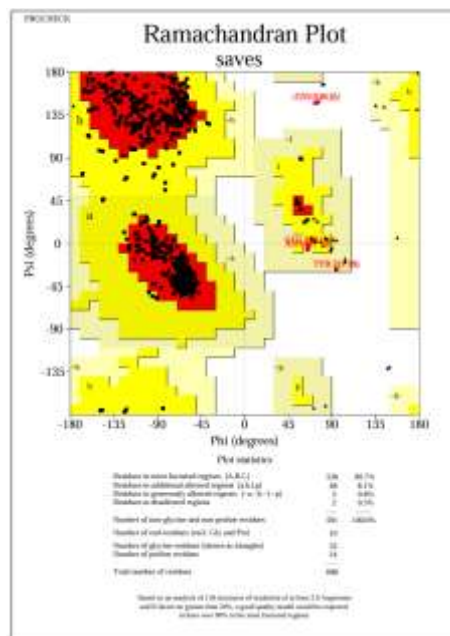
Prediksi toksisitas dan parameter ADME dilakukan menggunakan pkCSM (<https://biosig.lab.uq.edu.au/pkcsml/>), sedangkan evaluasi kelayakan senyawa sebagai kandidat obat oral dilakukan menggunakan SwissADME (<http://www.swissadme.ch>) berdasarkan Lipinski's Rule of Five (Amin et al., 2023; Naufa et al., 2021).

Proses virtual screening dan molecular docking dilakukan menggunakan PyRx untuk memperoleh nilai binding affinity masing-masing senyawa terhadap reseptor GSK-3 β . Hasil docking kemudian divisualisasikan menggunakan BIOVIA Discovery Studio Visualizer untuk mengamati interaksi antara ligan dan residu asam amino pada sisi aktif protein target (Puteri et al., 2021; Nursanti et al., 2022).

3. Hasil dan Diskusi

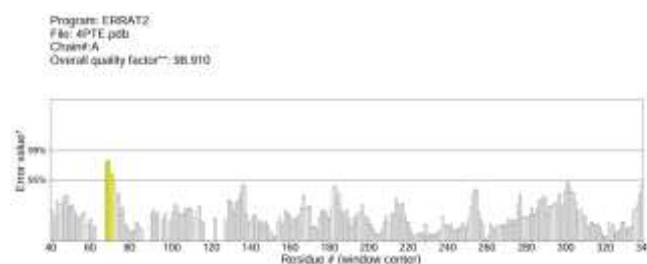
a. Analisis dan Identifikasi Reseptor

Analisis reseptor dilakukan menggunakan protein target Glycogen Synthase Kinase-3 Beta (GSK-3 β) dengan kode PDB 4PTE yang diperoleh dari Protein Data Bank. Protein ini dipilih karena berperan dalam regulasi metabolisme glukosa dan jalur pensinyalan insulin sehingga berpotensi menjadi target terapi diabetes melitus. Evaluasi kualitas struktur protein dilakukan menggunakan analisis Plot Ramachandran untuk mengetahui distribusi residu asam amino pada daerah yang diizinkan dan tidak diizinkan. Protein dikatakan memiliki kualitas yang baik apabila memiliki persentase pada daerah residu *disallowed regions* kurang dari 0,8% dan persentase residu pada *most favoured regions* lebih dari 90% (Aziz *et al.*, 2022).



Gambar 1. Hasil Plot Ramachandran 4PTE

Berdasarkan hasil analisis, reseptor 4PTE memiliki residu pada *most favoured region* sebesar 90,7% dan *disallowed region* sebesar 0,3%. Hasil tersebut menunjukkan bahwa struktur protein memiliki kualitas yang baik dan layak digunakan dalam proses *molecular docking*. Kualitas struktur protein selanjutnya dievaluasi menggunakan server ERRAT. Analisis ini digunakan untuk menilai kualitas struktur protein berdasarkan interaksi atom non-ikatan pada model tiga dimensi protein (Mustopa *et al.*, 2023).



Gambar 2. Hasil Overall Quality Factor ERRAT 4PTE

Hasil analisis menunjukkan bahwa reseptor 4PTE memiliki nilai *overall quality factor* sebesar 98,910. Nilai tersebut menunjukkan bahwa struktur protein memiliki kualitas yang sangat baik sehingga memenuhi kriteria untuk digunakan sebagai reseptor target pada proses *molecular docking*.

b. Validasi Metode Docking

Validasi metode *molecular docking* dilakukan untuk menentukan posisi dan ukuran *grid box* yang akan digunakan pada proses penambatan molekul. Tahap ini bertujuan untuk memastikan bahwa parameter docking

yang digunakan mampu mereproduksi posisi ligan alami pada sisi aktif reseptor GSK-3 β . Metode docking dinyatakan valid apabila menghasilkan nilai *Root Mean Square Deviation* (RMSD) kurang dari 2 Å (Puteri *et al.*, 2021).

Tabel 1. Pengaturan Grid Box dan Hasil Validasi Docking

Kode PDB	4PTE	
Center (Å)	x	-4,076
	y	0,527
	z	-35,764
Box Dimension (Å)	x	40
	y	40
	z	40
Spacing	0.375	
RMSD	1,59 Å	
Binding Affinity (kkal/mol)	-7,72	

Sumber : Olah Data, 2026

Berdasarkan hasil validasi, diperoleh nilai RMSD sebesar 1,59 Å. Nilai tersebut menunjukkan bahwa proses *redocking* telah memenuhi kriteria validasi karena berada di bawah 2 Å. Hasil ini mengindikasikan bahwa parameter docking yang digunakan mampu mereproduksi posisi ligan alami pada sisi aktif reseptor sehingga dapat digunakan pada tahap *virtual screening* dan *molecular docking* senyawa bioaktif *Ocimum basilicum*.



Gambar 3. Overlay Struktur Ligan Alami

Visualisasi hasil validasi menunjukkan bahwa ligan sebelum penambatan ditampilkan dengan warna hijau, sedangkan ligan setelah penambatan ditampilkan dengan warna kuning. Posisi kedua ligan yang saling bertumpang tindih (*overlay*) menunjukkan tingkat kesesuaian pose yang baik antara ligan alami dan ligan hasil *redocking*. Hasil tersebut didukung oleh nilai RMSD sebesar 1,59 Å yang berada di bawah batas penerimaan yaitu 2 Å, sehingga reseptor 4PTE dinyatakan valid dan dapat digunakan pada tahap *virtual screening* serta *molecular docking* senyawa bioaktif *Ocimum basilicum*

c. Prediksi Toksisitas dan Farmakokinetik

Prediksi toksisitas dilakukan terhadap 30 senyawa bioaktif *Ocimum basilicum* menggunakan web server pkCSM untuk mengevaluasi profil keamanan awal senyawa. Parameter yang digunakan meliputi *Ames Toxicity* dan

DOI: <https://doi.org/10.31004/riggs.v5i2.10087>

Lisensi: Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0)

Hepatotoxicity yang berfungsi untuk memprediksi potensi mutagenik serta kemungkinan efek toksik senyawa terhadap organ hati (Rana *et al.*, 2021). Berdasarkan hasil prediksi, diperoleh 24 senyawa yang tidak menunjukkan potensi toksisitas sehingga dapat dilanjutkan ke tahap analisis farmakokinetik.

Analisis farmakokinetik dilakukan berdasarkan parameter *Absorption, Distribution, Metabolism, and Excretion* (ADME). Parameter Human Intestinal Absorption (HIA) dan Caco-2 digunakan untuk mengevaluasi kemampuan absorpsi senyawa, sedangkan *blood-brain barrier* (BBB) dan *volume distribution steady state* (VDss) digunakan untuk memprediksi distribusi senyawa di dalam tubuh. Aktivitas enzim CYP3A4 digunakan untuk memprediksi proses metabolisme, sementara *total clearance* dan substrat OCT2 renal digunakan untuk mengevaluasi proses ekskresi senyawa (Pires *et al.*, 2015).

d. Lipinski's Rule Of Five

Analisis *drug-likeness* dilakukan menggunakan website SwissADME berdasarkan kriteria *Lipinski's Rule of Five* untuk mengevaluasi potensi senyawa sebagai kandidat obat oral. Parameter yang digunakan meliputi berat molekul kurang dari 500 Da, nilai LogP kurang dari 5, jumlah donor ikatan hidrogen tidak lebih dari 5, jumlah akseptor ikatan hidrogen tidak lebih dari 10, dan nilai molar refractivity berada pada rentan 40-130. Kriteria tersebut digunakan untuk memprediksi kemampuan absorpsi dan permeabilitas senyawa dalam tubuh (Daina *et al.*, 2017).

Berdasarkan hasil analisis, diperoleh 13 senyawa yang memenuhi seluruh kriteria *Lipinski's Rule of Five*. Hasil tersebut menunjukkan bahwa senyawa-senyawa tersebut memiliki karakteristik fisikokimia yang mendukung bioavailabilitas oral yang baik dan berpotensi untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat obat antidiabetes. Senyawa yang memenuhi kriteria Lipinski kemudian dipilih untuk tahap *molecular docking* terhadap reseptor GSK-3 β .

e. Virtual Screening dan Docking Ligan Terhadap Reseptor Target

Tahap *virtual screening* dilakukan terhadap 13 senyawa bioaktif *Ocimum basilicum* yang telah memenuhi kriteria toksisitas, farmakokinetik, dan *Lipinski's Rule of Five*. Analisis ini bertujuan untuk mengidentifikasi senyawa yang memiliki afinitas terbaik terhadap reseptor Glycogen Synthase Kinase-3 Beta (GSK-3 β). Proses *molecular docking* diawali dengan penentuan parameter *grid box* pada sisi aktif reseptor yang telah divalidasi sebelumnya. Selanjutnya, proses penambatan dilakukan menggunakan metode *Lamarckian Genetic Algorithm* (LGA) dengan 100 kali *run* untuk memperoleh konformasi ikatan yang paling stabil dan nilai energi ikatan terbaik antara ligan dan reseptor target (Pinzi & Rastelli, 2019).

Tabel 2. Hasil Virtual Screening Reseptor (4PTE)

Senyawa	ΔG (kkal/mol)	Ki (μM)
Ligan Alami (4PTE)	-7,51	3,11
Metformin	-4,13	937,80
Salvigenin	-7,57	2,82
Nevadensin	-7,50	3,20
Ladenein	-7,43	3,58
Nepetoidin A	-7,27	4,68
Gardenin B	-7,23	5,01
Acacetin	-7,05	6,80
Pendunculin	-6,86	9,37
Cyanidin	-6,56	15,56
Labiatic acid	-6,44	19,11
Caffeic acid	-5,71	65,62
p-Coumaric acid	-5,52	90,64

DOI: <https://doi.org/10.31004/riggs.v5i2.10087>

Lisensi: Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0)

<i>Nerolidol</i>	-5,16	165,69
<i>Coniferyl alcohol</i>	-5,14	170,64

Sumber : Olah Data, 2026

Berdasarkan hasil *virtual screening*, masing-masing senyawa menunjukkan nilai energi ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (K_i) yang berbeda terhadap reseptor GSK-3 β . *Salvigenin* menghasilkan nilai *binding affinity* sebesar -7,57 kkal/mol yang merupakan nilai terbaik di antara senyawa yang diuji dan paling mendekati ligan alami dengan nilai *binding affinity* sebesar -7,51 kkal/mol. Selain itu, *Salvigenin* juga menunjukkan nilai konstanta inhibisi (K_i) yang rendah, yang mengindikasikan afinitas pengikatan yang baik terhadap reseptor target. Semakin rendah nilai ΔG dan K_i yang diperoleh, maka semakin stabil kompleks ligan dengan reseptor yang terbentuk. Oleh karena itu, *Salvigenin* dipilih sebagai senyawa terbaik dan berpotensi untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat antidiabetes dari *Ocimum basilicum*.

f. Visualisasi Hasil Docking

Visualisasi dilakukan terhadap *Salvigenin* sebagai senyawa terbaik hasil *virtual screening* untuk mengidentifikasi pola interaksi yang terbentuk antara ligan dan reseptor GSK-3 β . Analisis difokuskan pada interaksi yang berperan dalam pembentukan dan kestabilan kompleks ligan dengan protein, terutama ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik. Ikatan hidrogen merupakan interaksi non-kovalen yang terjadi antara atom hidrogen dengan atom elektronegatif, seperti oksigen atau nitrogen, sehingga berperan dalam meningkatkan afinitas dan spesifisitas pengikatan ligan terhadap protein (Ma *et al.*, 2024). Sementara itu, interaksi hidrofobik terjadi akibat kecenderungan gugus nonpolar untuk berasosiasi dalam lingkungan berair dan berkontribusi dalam menjaga kestabilan kompleks ligan dengan protein yang terbentuk (Sun, 2022).

Tabel 3. Interaksi Reseptor Dengan Senyawa *Salvagenin*

Senyawa		Ikatan Hidrogen	Ikatan Hidrofobik
Ligan	Alami (4PTE)	ASN 186, ASP 200, ASP 133, VAL 135	CYS 199, LEU 132, VAL 70, ALA 83, ILE 62 , TYR 134, THR 138, GLU 137, PRO 136, LEU 188, LYS 85, PHE 67
Metformin		ILE 62, TYR 134, VAL 135	LEU 188, THR 138, ARG 141, PRO 136, ALA 83
<i>Salvigenin</i>		LYS 85, VAL 135 , PRO 136, TYR 134, CYS 199, GLU 97	GLU 137, LEU 132, PHE 201, ASP 200, VAL 70, VAL 110, LEU 188, ALA 83, ILE 62, ARG 141

Sumber : Olah Data, 2026

Keterangan: kata yang dicetak tebal menunjukkan adanya interaksi yang sama dengan ligan alami

Hasil visualisasi menunjukkan bahwa ligan alami, metformin, dan *Salvigenin* sama-sama membentuk ikatan hidrogen dengan residu VAL 135. Kesamaan interaksi tersebut mengindikasikan bahwa ketiga senyawa memiliki orientasi pengikatan yang serupa pada sisi aktif reseptor GSK-3 β . Selain itu, *Salvigenin* membentuk jumlah ikatan hidrogen yang lebih banyak dibandingkan metformin serta menunjukkan beberapa kesamaan interaksi dengan ligan alami. Kondisi ini menunjukkan bahwa *Salvigenin* memiliki kemampuan pengikatan yang baik terhadap reseptor GSK-3 β dan mendukung hasil *molecular docking* yang menunjukkan nilai *binding affinity* mendekati ligan alami.

4. Kesimpulan

Hasil studi *in silico* menunjukkan bahwa senyawa bioaktif *Ocimum basilicum* memiliki potensi sebagai kandidat antidiabetes melalui penghambatan reseptor Glycogen Synthase Kinase-3 Beta (GSK-3 β). *Salvigenin* merupakan senyawa terbaik dengan nilai *binding affinity* sebesar -7,57 kkal/mol dan konstanta inhibisi (Ki) sebesar 2,82 μ M. Senyawa ini memenuhi parameter keamanan, farmakokinetik, dan kriteria *Lipinski's Rule of Five* serta menunjukkan pola interaksi yang serupa dengan ligan alami pada sisi aktif reseptor. *Salvigenin* berpotensi untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat obat antidiabetes berbasis bahan alam.

Referensi

1. American Diabetes Association. (2024). *Standards of care in diabetes—2024*. *Diabetes Care*, 47(Supplement_1). American Diabetes Association.
2. Agu, P. C., Afiukwa, C. A., Orji, O. U., Ezech, E. M., Ofoke, I. H., Ogbu, C. O., Ugwuja, E. I., & Aja, P. M. (2023). Molecular docking as a tool for the discovery of molecular targets of nutraceuticals in diseases management. *Scientific Reports*, 13(1), 13398.
3. Amin, S., Mutahar, N. L., Kamilah, D., & Yulianingsih, T. S. (2024). Studi *in silico* senyawa daun salam sebagai antidiabetes melalui mekanisme inhibitor SGLT-2. *Jurnal Ilmu Medis Indonesia*, 4(1), 21–29.
4. Arista, D., Girsang, E., & Napiah, A. (2024). Anti diabetic activity of *Ocimum basilicum* extract: Literature review. *Jurnal Kesehatan Sainika Meditory*, 7(1), 234–332.
5. Aziz, A., Andrianto, D., & Safithri, M. (2022). Molecular docking of bioactive compounds from wungu leaves (*Graptophyllum pictum* (L.) Griff.) as tyrosinase inhibitors. *Indonesian Journal of Pharmaceutical Science and Technology*, 9(2), 96–107.
6. Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports*, 7, 42717.
7. Davies, M. J., Aroda, V. R., Collins, B. S., Gabbay, R. A., Green, J., Maruthur, N. M., Rosas, S. E., Del Prato, S., Mathieu, C., Mingrone, G., Rossing, P., Tankova, T., Tsapas, A., & Buse, J. B. (2022). Management of hyperglycemia in type 2 diabetes, 2022: A consensus report by the American Diabetes Association (ADA) and the European Association for the Study of Diabetes (EASD). *Diabetes Care*, 45(11), 2753–2786.
8. Elansary, H. O., Szopa, A., Kubica, P., Ekiert, H., El-Ansary, D. O., Al-Mana, F. A., & Mahmoud, E. A. (2020). Saudi *Rosmarinus officinalis* and *Ocimum basilicum* L. polyphenols and biological activities. *Processes*, 8(4), 446.
9. Fardhani, I. M., & Graciella, C. (2023). Potensi aktivitas antidiabetes daun kemangi (*Ocimum basilicum*): Literature review. *Prepotif: Jurnal Kesehatan Masyarakat*, 7(1), 564–574.
10. Ma, Z., Ajibade, A., & Zou, X. (2024). Docking strategies for predicting protein-ligand interactions and their application to structure-based drug design. *Communications in Information and Systems*, 24(3), 199–230.
11. Mustopa, A. Z., Izaki, A. F., Suharsono, S., Fatimah, F., Fauziyah, F., Damarani, R., Arwansyah, A., Wahyudi, S. T., Sari, S. S., Rozirwan, R., & Bachtiar, Z. (2023). Characterization, protein modeling, and molecular docking of factor C from Indonesian horseshoe crab (*Tachypleus gigas*). *Journal of Genetic Engineering and Biotechnology*, 21(1), 44.
12. Naufa, F., Mutiah, R., & Indrawijaya, Y. Y. A. (2021). Studi *in silico* potensi senyawa katekin teh hijau (*Camellia sinensis*) sebagai antivirus SARS-CoV-2 terhadap spike glycoprotein (6LZG) dan main protease (5R7Y). *Journal of Food and Pharmaceutical Sciences*, 10(1), 584–596.
13. Nursanti, O., Wardani, I., & Hadisoebroto, G. (2022). Validasi penambatan molekuler (*docking*) *Zingiber officinale* dan *Cymbopogon citratus* sebagai ligan aktif reseptor PPAR γ . *Jurnal Farmasi Higea*, 14(1), 79–86.
14. Pinzi, L., & Rastelli, G. (2019). Molecular docking: Shifting paradigms in drug discovery. *International Journal of Molecular Sciences*, 20(18), 4331.
15. Pires, D. E., Blundell, T. L., & Ascher, D. B. (2015). pkCSM: Predicting small-molecule pharmacokinetic and toxicity properties using graph-based signatures. *Journal of Medicinal Chemistry*, 58(9), 4066–4072.
16. Puteri, S., Nugraha, D., Fujiyanti, V., & Ruswanto, R. (2021). Analisis molecular docking potensi senyawa artocarpin dari ekstrak daun kluwih (*Artocarpus camansi*) sebagai antidiabetes secara *in silico*. *Jurnal Kesehatan Bakti Tunas Husada*, 21(2), 283–292.
17. Rana, K. M., Maowa, J., Alam, A., Dey, S., Hosen, A., Hasan, I., Fujii, Y., Ozeki, Y., & Kawsar, S. M. A. (2021). *In silico* DFT study, molecular docking, and ADMET predictions of cytidine analogs with antimicrobial and anticancer properties. *In Silico Pharmacology*, 9(1), 42.
18. Sun, H., Saeedi, P., Karuranga, S., Pinkepank, M., Ogurtsova, K., Duncan, B. B., Stein, C., Basit, A., Chan, J. C. N., Mbanya, J. C., Pavkov, M. E., Ramachandaran, A., Wild, S. H., James, S., Herman, W. H., Zhang, P., Bommer, C., Kuo, S., Boyko, E. J., & Magliano, D. J. (2022). IDF Diabetes Atlas: Global, regional and country-level diabetes prevalence estimates for 2021 and projections for 2045. *Diabetes Research and Clinical Practice*, 183, 109119.
19. Sun, Q. (2022). The hydrophobic effects: Our current understanding. *Molecules*, 27(20), 1–27.
20. Teli, D. M., & Gajjar, A. K. (2023). Glycogen synthase kinase-3: A potential target for diabetes. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 92, 117406.
21. World Health Organization. (2023). *Diabetes*. <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/diabetes>
22. Yazidi, M., Kammoun, E., Oueslati, I., & Chihaoui, M. (2024). Metformin-induced vitamin B12 deficiency in patients with type 2 diabetes: A narrative review with a practical approach for screening, diagnosing, and managing vitamin B12 deficiency. *Korean Journal of Family Medicine*, 45(4), 189–198.
23. Zhakipbekov, K., Turgumbayeva, A., Akhelova, S., Bekmuratova, K., Blinova, O., Utegenova, G., Shertaeva, K., Sadykov, N., Tastambek, K., Saginbazarova, A., Urazgaliyev, K., Tulegenova, G., Zhalimova, Z., & Karasova, Z. (2024). Antimicrobial and other pharmacological properties of *Ocimum basilicum*, Lamiaceae. *Molecules*, 29(2), 388.