

**ANALISIS POTENSI TERAPEUTIK BUNGA TELANG (*Clitoria ternatea*
L.) PADA DIABETES MELITUS TIPE 2 MELALUI PENDEKATAN
NETWORK PHARMACOLOGY DAN *MOLECULAR DOCKING***



Skripsi

**Diajukan ke Fakultas Kedokteran Universitas Andalas sebagai
Pemenuhan Salah Satu Syarat untuk Mendapatkan
Gelara Sarjana Ilmu Biomedis**

Pembimbing :

- 1. Dr. Dessy Arisanty, M.Sc**
- 2. Dra. Dian Pertiwi, MS**

Oleh :

**MUHAMMAD LUTHFI KAMIL
NIM : 2110341009**

**PRODI ILMU BIOMEDIS PROGRAM SARJANA
FAKULTAS KEDOKTERAN
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG 2026**

ABSTRACT

ANALYSIS OF THE THERAPEUTIC POTENTIAL OF BUTTERFLY PEA FLOWER (*Clitoria Ternatea* L.) IN TYPE 2 DIABETES MELLITUS USING NETWORK PHARMACOLOGY AND MOLECULAR DOCKING

By

Muhammad Luthfi Kamil, Dessy Arisanty, Dian Pertiwi, Rita Maliza, Almurdi, Elmatris

*Type 2 Diabetes Mellitus (T2DM) is a complex metabolic disorder that requires a multi-target therapeutic strategy. Butterfly pea (*Clitoria ternatea* L.) is empirically known for its anti-diabetic potential, yet its molecular mechanisms through various protein target interactions require scientific validation. This study aims to analyze the therapeutic potential of active compounds from butterfly pea against T2DM using network pharmacology and molecular docking approaches.*

Compound identification was performed using Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry (LC-MS/MS), followed by screening for drug-likeness, pharmacokinetic profiles (ADME), toxicity, and biological activity predictions. Network pharmacology analysis was employed to identify the correlation between compounds and disease hub genes. Subsequently, molecular docking simulations were conducted to evaluate binding affinities and amino acid residue interactions against key target proteins.

LC-MS/MS analysis identified 30 compounds, five of which met the screening criteria. Network pharmacology identified 57 target proteins relevant to T2DM, with AKT1, SRC, and PPAR γ as the primary hub genes. Molecular docking results showed that O-glutaryl carnitine potentially acts as an AKT1 activator with a binding affinity of -6.05 kcal/mol, interacting with key residues Lys14, Glu17, Tyr18, and Arg23. Kaempferol showed potential as an SRC inhibitor (-6.8 kcal/mol) through interaction with Met341. Meanwhile, 7-octadecynoic acid acted as a PPAR γ agonist with a binding affinity of -8.5 kcal/mol, involving the Tyr473 residue. It is concluded that butterfly pea active compounds possess synergistic therapeutic potential against T2DM by modulating the AKT1, SRC, and PPAR γ pathways.

Keywords: *Clitoria ternatea* L., Type 2 Diabetes Mellitus, Network Pharmacology, Molecular Docking, AKT1, SRC, PPAR γ

ABSTRAK

ANALISIS POTENSI TERAPEUTIK BUNGA TELANG (*Clitoria ternatea* L.) PADA DIABETES MELITUS TIPE 2 MELALUI PENDEKATAN *NETWORK PHARMACOLOGY* DAN *MOLECULAR DOCKING*

Oleh

Muhammad Luthfi Kamil, Dessy Arisanty, Dian Pertiwi, Rita Maliza, Almurdi, Elmatris

Diabetes Melitus Tipe 2 (DMT2) merupakan gangguan metabolik kompleks yang memerlukan strategi terapi multitarget. Bunga telang (*Clitoria ternatea* L.) secara empiris dikenal memiliki potensi antidiabetes, namun mekanisme molekulernya melalui berbagai interaksi protein target memerlukan validasi ilmiah. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi terapeutik senyawa aktif dari bunga telang terhadap DMT2 menggunakan pendekatan *network pharmacology* dan *molecular docking*.

Identifikasi senyawa dilakukan menggunakan *Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry* (LC-MS/MS), dilanjutkan dengan skrining sifat *drug-likeness*, profil farmakokinetik (ADME), toksisitas, dan prediksi aktivitas biologis. Analisis *network pharmacology* digunakan untuk mengidentifikasi korelasi antara senyawa dengan *hub genes* penyakit. Selanjutnya, simulasi *molecular docking* dilakukan untuk mengevaluasi afinitas ikatan dan interaksi residu asam amino terhadap protein target utama.

Hasil analisis LC-MS/MS mengidentifikasi 30 senyawa, lima di antaranya memenuhi kriteria penapisan. *Network pharmacology* mengidentifikasi 57 protein target yang relevan dengan DMT2, dengan AKT1, SRC, dan PPAR γ sebagai *hub genes* utama. Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa *O-glutaryl carnitine* berpotensi bertindak sebagai aktivator AKT1 dengan afinitas ikatan sebesar -6,05 kcal/mol, yang berinteraksi dengan residu kunci Lys14, Glu17, Tyr18, dan Arg23. Kaempferol menunjukkan potensi sebagai inhibitor SRC (-6,8 kcal/mol) melalui interaksi dengan Met341. Sementara itu, *7-octadecynoic acid* bertindak sebagai agonis PPAR γ dengan afinitas ikatan -8,5 kcal/mol yang melibatkan residu Tyr473. Disimpulkan bahwa senyawa aktif bunga telang memiliki potensi terapeutik sinergis terhadap DMT2 melalui modulasi jalur AKT1, SRC, dan PPAR γ .

Kata Kunci: *Clitoria ternatea* L., Diabetes Melitus Tipe 2, *Network Pharmacology*, *Molecular Docking*, AKT1, SRC, PPAR γ