

Analisis *In Silico* Senyawa Kimia pada Daun *Anredera cordifolia* (Binahong) sebagai Antidiabetes

Loviana Erwinda Sari¹, Dhinar Kresna Shaktinastiti¹, Dimas Bayu Bukhori¹, Early Nur Rahma¹, Agus Muji Santoso²

¹ Program Studi Pendidikan Biologi Universitas Nusantara PGRI Kediri

* Penulis korespondensi: lopinawinda@gmail.com

ABSTRACT

The objective of this study was to identify chemical compounds in *Anredera cordifolia* leaves with antidiabetic potential using an *in silico* approach. Four compounds were analyzed, namely morin, myricetin, vitexin, and isovitexin. The study employed *in silico* analysis using several bioinformatics platforms, including SwissADME, Way2Drug, and ProTox-3.0. The results indicated that morin was the most promising candidate, as it fulfilled all Lipinski's Rule of Five criteria, exhibited high gastrointestinal absorption, and belonged to a low toxicity class with an LD₅₀ value of 3919 mg/kg. In contrast, the other compounds demonstrated limitations in pharmacological feasibility and toxicity profiles. This study supports the potential utilization of *Anredera cordifolia* leaves as a natural source of antidiabetic compounds for the development of alternative therapeutic agents.

Key words:

Anredera cordifolia, Antidiabetic compounds, *In silico* analysis, Toxicity prediction

Riwayat artikel

Diterima:16/11/2025

Diperbaiki:-

Terbit:8/5/2026

PENDAHULUAN

Binahong (*Anredera cordifolia*) adalah tanaman famili *Basellaceae* yang mudah tumbuh dimana saja, terlebih binahong mudah sekali untuk beradaptasi, tidak banyak orang yang tahu bahwa binahong atau dengan nama lain *Anredera cordifolia* ini memiliki banyak manfaatnya. Menurut (Makalalag *et. al* 2013) menyatakan bahwa binahong adalah tanaman yang multiguna mulai dari akar hingga daun dapat bermanfaat bagi manusia, salah satunya adalah sebagai tanaman anti diabetes.

Sebagai wilayah beriklim tropis, Indonesia memiliki kepulauan nusantara yang menyimpan beraneka ragam sumber daya nabati, khususnya berbagai jenis rempah serta tanaman herbal yang sudah dibuktikan manfaatnya melalui berbagai penelitian etnobotani untuk pengobatan modern. Salah satunya adalah tanaman *A. cordifolia* yang mempunyai habitat di tempat teduh dan agak lembab, dimana tingkat cahaya matahari tidak terlalu tinggi, pada kondisi lingkungan yang baik, binahong dapat tumbuh sampai 7 meter. Tumbuhan merambat ini, yang dapat dijumpai di area hutan hujan maupun pesisir pantai, memiliki beberapa nama berbeda di berbagai negara seperti *meidera vine*, *potato vine*, *fat leaf*, *folha gorda*, dan *lamb's tail vine*. Pemanfaatan bahan-bahan alami termasuk binahong sebagai pengobatan tradisional sudah menjadi kebiasaan turun-temurun di kalangan penduduk setempat (Gusnimar *et al.*,

2021). Tanaman ini menyebar mulai dari dataran Cina sampai Asia Tenggara, khusus di Indonesia disebut binahong (Manoi dan Balittro, 2009).

Hasil penelitian sebelumnya yang dilaksanakan di Kemukiman Bambi, diketahui bahwa masyarakat di Pemukiman Bambi Kecamatan Peukan Baro Kabupaten Pidie yang menjadi responden dalam penelitian memiliki kearifan lokal yang sudah turun menurun dibudayakan, terutama dalam penggunaan obat tradisional dan mempreparasi obat-obat tradisional. Berbagai metode yang sudah diterapkan secara turun-temurun berupa metode rebus, diseduh dalam air panas, di jus, tumbuk dan oles. Bahkan beberapa masyarakat mengkonsumsi tanaman binahong secara langsung (Dewi et al., 2019). Daun binahong dijadikan lalapan oleh sebagian masyarakat Kemukiman Bambi. Mengkonsumsi tanaman binahong mentah-mentah dipercaya mampu menjaga khasiat dan manfaat yang terkandung di dalam daunnya. Khasiat dan manfaat tersebut utuh masuk ke tubuh tanpa terbuang sia-sia saat dimakan mentah-mentah dibandingkan dengan diolah terlebih dahulu. Metode preparasi yang paling banyak digunakan oleh masyarakat adalah metode rebus. Proses perebusan menjadikan tanaman binahong matang sehingga lebih aman dikonsumsi dan mengurangi rasa pahit bila dibandingkan dengan dilalap atau dimakan langsung. Selain itu, proses penyembuhannya lebih cepat karena langsung diproses dalam metabolisme tubuh (Due, 2013). Metode perebusan menjadi metode yang paling dominan karena diyakini dapat mengeluarkan kandungan kimia lebih optimal, mengurangi rasa pahit, dan mengurangi kandungan getah pada daun *A. cordifolia*. Menurut Syah et al. (2014) proses perebusan dapat mengeluarkan zat yang terkandung pada tumbuhan dibandingkan dengan cara dibakar. Proses perebusan akan meningkatkan suhu larutan. Bahwa semakin tinggi temperatur maka kelarutan suatu zat semakin besar (Voight, 1994). Mengkonsumsi rebusan daun binahong disarankan tidak berlebihan dan sebaiknya dikonsumsi 2 kali sehari. Untuk mendapatkan manfaat yang optimal, bisa merebus 1-2 lembar daun binahong dengan 2 gelas air hingga mendidih, kemudian diminum secukupnya selagi masih hangat.

Berbagai studi menunjukkan bahwa daun *A. cordifolia* mengandung senyawa metabolit sekunder seperti flavonoid, saponin, dan alkaloid yang berpotensi sebagai antidiabetes dan antioksidan (Astuti, 2011). Penelitian *in silico* oleh Mulia et al. (2023) menunjukkan bahwa beta-sitosterol, salah satu senyawa utama dalam daun binahong, memiliki afinitas kuat terhadap enzim aldosa reduktase-enzim yang berperan dalam komplikasi diabetes dengan energi bebas Gibbs sebesar -12,75 kkal/mol dan konstanta inhibisi 452,55 pM. Interaksi ini terjadi pada residu VAL A:47 dan CYS A:298 dari enzim tersebut. Beta-sitosterol juga menunjukkan profil farmakokinetik yang baik, termasuk nilai *Human Intestinal Absorption* (HIA) dan permeabilitas Caco2 yang tinggi, serta tidak bersifat mutagenik atau karsinogenik, dan memenuhi aturan Lipinski. Selain itu, senyawa lain seperti asam ursolat dan vitexin juga menunjukkan potensi sebagai inhibitor aldosa reduktase. Temuan ini diperkuat oleh studi *in vivo* yang menunjukkan kemampuan ekstrak daun binahong dalam menurunkan kadar glukosa darah dan memperbaiki kerusakan sel β -pankreas pada hewan model diabetes (Rahmawati et al., 2022). Dengan demikian, eksplorasi senyawa aktif daun binahong dapat menjadi landasan bagi pengembangan terapi diabetes yang lebih efektif, aman, dan berkelanjutan.

Daun Binahong memiliki khasiat untuk menyembuhkan luka dalam, luka luar, mempercepat pemulihan kesehatan setelah pembedahan, melancarkan peredaran darah, mencegah stroke, menyembuhkan penyakit maag, menyembuhkan asam urat, menyembuhkan diabetes, menjaga daya tahan tubuh dan melancarkan daya tahan tubuh (Tjahjani & Yusniawati, 2017). Binahong memiliki beberapa khasiat, sesuai yang disampaikan Narasumber, Binahong mampu menurunkan tekanan darah. Hal ini didukung dengan penelitian Siswantari (2011) yang menyatakan bahwa pemberian air rebusan daun binahong berpengaruh terhadap penurunan tekanan sistolik dan diastolik pada penderita hipertensi. Selain itu, Binahong juga bisa

mempercepat penyembuhan luka, mencegah diabetes, menurunkan kolesterol dan obat asam urat (Agustin, 2022). Berdasarkan deskripsi sebelumnya binahong memiliki potensi sebagai antioksidan dan sekaligus antidiabetik. Namun informasi yang bertanggung jawab dalam aktivitas diabetik pada sel tubuh belum diungkap. Oleh karena itu tujuan penelitian ini adalah menganalisis senyawa kimia pada daun *Anredera cordifolia* sebagai antidiabetes secara *in silico*.

METODE

Penelitian ini menerapkan metode deskriptif eksploratif untuk mengkaji potensi senyawa kimia yang terdapat pada daun *Anredera cordifolia* (binahong) sebagai agen antidiabetes, dengan menganalisis mekanisme metabolisme dan toksisitasnya selama proses penyerapan dalam tubuh melalui pendekatan *in silico*. Penelitian deskriptif eksploratif ini bertujuan untuk mengidentifikasi data yang mampu memberikan pemahaman atau penjelasan mengenai konsep atau pola yang digunakan dalam penelitian.

1. Alat dan bahan

Penelitian ini menggunakan perangkat keras yaitu laptop lenovo k14 gen 1, dengan processor Intel Core i5-1135G7 8GB RAM 512GB SSD dengan sistem operasi Windows 11 14 inch Laptop. Pencarian literatur rujukan menggunakan Google Scholar <https://scholar.google.com/>

2. Prosedur

2.1 Penyiapan Canonical SMILES

Melalui beberapa jurnal rujukan yang didapatkan ada 5 senyawa kimia yang berpotensi menjadi obat antidiabetik. Pada penelitian ini hanya mengambil 1 senyawa untuk dianalisis secara lanjut karena terdapat 4 komponen yang berada di senyawa tersebut. 4 komponen yang dianalisis dalam penelitian ini adalah vitexin, isovitexin, morin, dan myricetin. Kemudian dilakukan analisis dengan mencari *database* canonical SMILE masing-masing komponen, menggunakan website PubChem <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>.

2.2 Analisis Aktivitas Senyawa

Setelah menemukan notasi baris SMILES, di copy dan kemudian dilakukan analisis aktivitas senyawa dicari satu persatu aktivitas yang berhubungan dengan antidiabetik. Tidak hanya aktivitas saja tetapi juga menganalisis skor Pa pada setiap senyawa. Skor Pa batas minimal adalah 0,7 menggunakan website Way2Drug <https://www.way2drug.com/>.

2.3 Analisis Lipinski

Selanjutnya dilakukan analisis kemiripan obat (drug-likeness) berdasarkan aturan Lipinski (Lipinski's Rule of Five) menggunakan situs SwissADME di <https://www.swissadme.ch/>. Aturan ini menyatakan bahwa suatu senyawa dianggap memiliki karakteristik mirip obat jika memenuhi beberapa kriteria, yaitu memiliki berat molekul kurang dari 500 dalton, nilai log P (koefisien partisi) di bawah 5, jumlah donor ikatan hidrogen (HBD) kurang dari 5, serta jumlah akseptor ikatan hidrogen (HBA) tidak lebih dari 10. Prinsip ini banyak digunakan dalam proses penemuan dan pengembangan obat untuk mengevaluasi potensi sifat farmakologis suatu senyawa (Lipinski, 2000).

2.4 Analisis ADMET

Prediksi fisikokimia dan farmakokinetik yaitu ADME (Absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas) dari keempat senyawa menggunakan

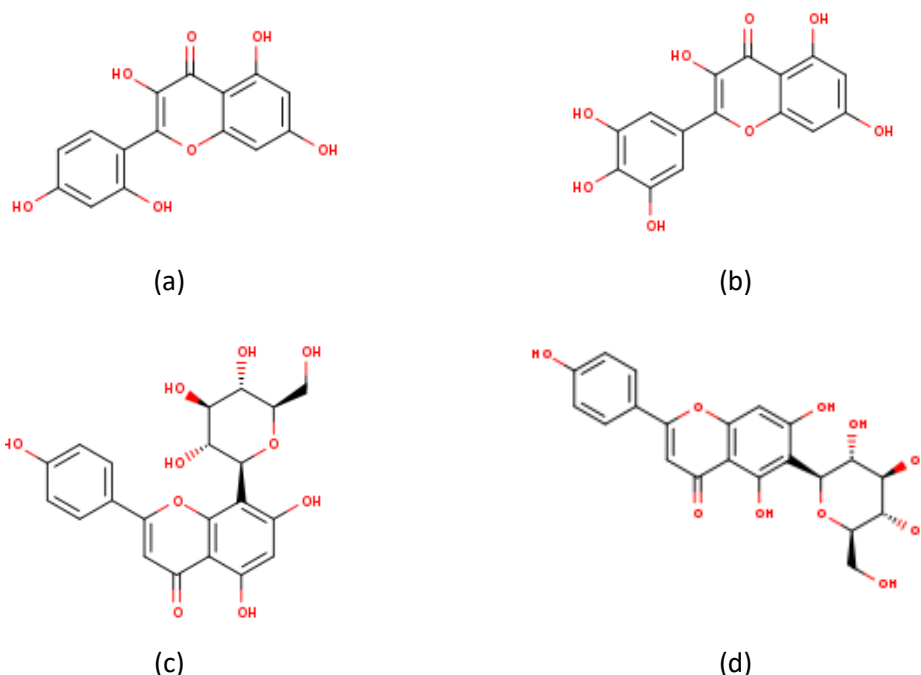
website SwissADME <http://www.swissadme.ch/>. Absorpsi adalah proses penyerapan obat dari tempat pemberian yang mencakup seberapa cepat dan seberapa banyak obat diserap. Dalam pemberian oral, sebagian obat dapat mengalami metabolisme oleh enzim di dinding usus atau di hati selama fase lintasan pertama. Akibatnya, meskipun penyerapan melalui saluran cerna berlangsung hampir sempurna, bioavailabilitas oral obat bisa tetap rendah

2.5 Uji Toksisitas

Toksisitas suatu senyawa dapat dianalisis melalui prediksi potensi toksisitas oral akut menggunakan AdmetSAR <http://lmmd.ecust.edu.cn/admetSar2/>. Website ini dapat memberikan gambaran awal mengenai kemungkinan efek toksik apabila senyawa dikonsumsi secara oral. Selanjutnya, dilakukan penentuan nilai LD50 sebagai indikator tingkat toksisitas menggunakan website ProTox-3.0 <https://tox.charite.de/protox3/>.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil analisis empat senyawa yang diketahui memiliki potensi sebagai antidiabetes, yaitu morin, myricetin, vitexin, dan isovitexin, telah dianalisis untuk mengevaluasi kelayakannya sebagai kandidat obat. Analisis ini dilakukan menggunakan pendekatan aturan Lipinski melalui platform SwissADME.



Gambar 1. Struktur 2 dimensi senyawa (a) morin (b) myricetin (c) vitexin (d) isovitexin

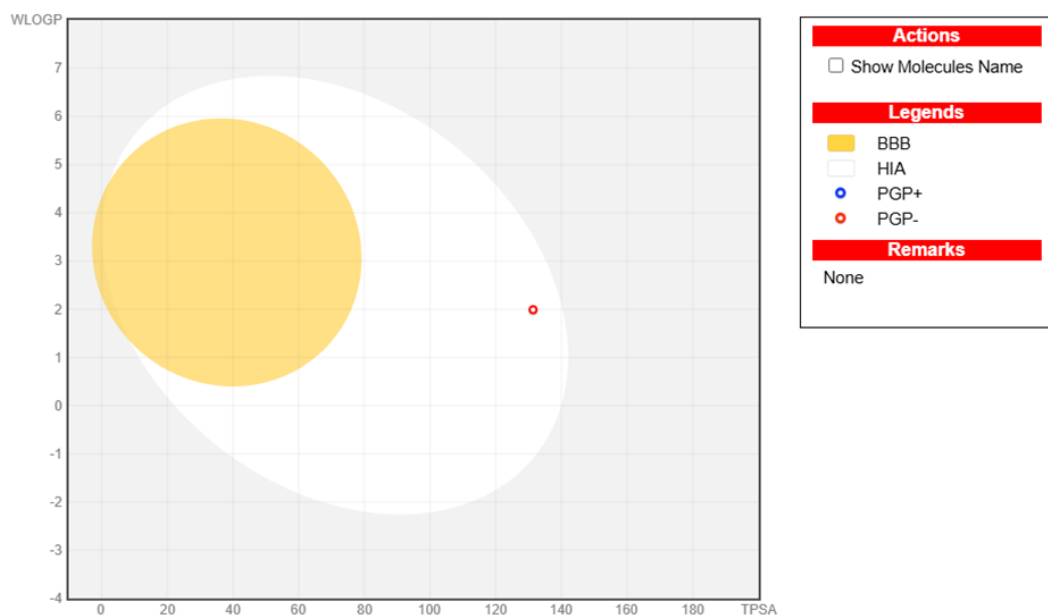
Tabel 1. Aturan Lipinski terhadap senyawa kimia pada daun *Anredera Cordifolia* Lipinski's.

Senyawa	Aturan Lipinski				
	Massa molekul ≤ 500 Da	MlogP ≤ 4,15 atau logP ≤ 5	Akseptor ikatan hidrogen ≤ 10	Donor ikatan hydrogen ≤ 5	Kelarutan dalam air
Morin	302,24 g/mol	1,47	7	5	Soluble
Myricetin	318,24 g/mol	1,08	8	6	Soluble
Vitexin	432,38 g/mol	1,63	10	7	Soluble
Isovitexin	432,38 g/mol	1,6	10	7	Soluble

Berdasarkan analisis SwissADME ditemukan 4 senyawa yang memiliki kemiripan aturan *Lipinski's*. Tetapi hanya senyawa Morin yang memenuhi aturan *Lipinski's*, karena memiliki massa molekul ≤ 500 Da, MlogP < 4,15 atau logP ≤ 5, Akseptor ikatan hidrogen ≤ 10, Donor ikatan hidrogen < 5, Kelarutan dalam air tinggi. Sedangkan yang Myricetin, Vitexin, dan Isovitexin tidak memenuhi aturan *Lipinski's*, karena donor ikatan hidrogen lebih dari 5.

Tabel 2. Prediksi ADMET

Senyawa	Gi Absorption	BBB Permeat	Pgp substrate	CYP Inhibitor					Bioavailability score
				1A 2	2C1 9	2C 9	2D 6	3A 4	
Morin	High	No	No	Yes	No	No	Yes	Yes	0,55
Myricetin	Low	No	No	Yes	No	No	No	Yes	0,55
Vitexin	Low	No	No	No	No	No	No	No	0,55
Isovitexin	Low	No	No	No	No	No	No	No	0,55



Gambar 2. BOILED-Egg meliputi BBB, HIA dan P-gp

Berdasarkan hasil prediksi menggunakan SwissADME untuk empat senyawa yang ditemukan di *A. cordifolia* kami memperoleh informasi bahwa nilai GI penyerapan senyawa morin tinggi. Ini menunjukkan bahwa Morin dapat diserap dengan baik dalam saluran

pencernaan, terutama di usus, yang membuat koneksi ini mudah untuk mencapai sistem sirkulasi. Kapasitas penyerapan yang baik ini dapat meningkatkan konsentrasi morin dalam darah, dan pada akhirnya mendukung efektivitas aktivitas farmakologinya (Vélezetal., 2022). Empat senyawa yang dianalisis menggunakan swissadme tidak dapat memasuki aliran darah otak (BBB). Oleh karena itu, risiko toksisitas sistem saraf pusat lebih aman (Shhofi, 2021). Analisis ini juga menunjukkan bahwa proses distribusi dan ketersediaan hayati tidak terpengaruh oleh produk obat, karena keempat koneksi tidak termasuk sebagai substrat PGP. Secara umum, proses metabolisme obat terjadi di hati dan usus, dan hati adalah sitokrom-P450 (Song et al., 2021). Hasil yang diprediksi hanya menunjukkan koneksi sebagai penghambat enzim sitokrom-P450. Sitokrom P450 (CYP) - inhibitor dapat mempengaruhi metabolisme obat dengan mengubah aktivitas enzim yang terlibat dalam konversi obat dan benda asing yang berbeda. CYP Ennements, khususnya CYP1A2, CYP2C9, CYP2C19, CYP2D6, dan CYP3A4, memainkan peran penting dalam sekitar 75% dari proses metabolisme obat. Jika obat menghambat enzim ini, ini dapat meningkatkan tingkat obat dalam darah, karena memperlambat laju (Zhao et al., 2021). Hasil prediksi juga menunjukkan bahwa dari kelima senyawa yang dianalisis, tidak ada satupun yang terdeteksi sebagai CYP2D6, sehingga kelima senyawa tersebut tidak memiliki potensi untuk menimbulkan efek hepatotoksik (Kim et al., 2015).

Berdasarkan hasil prediksi toksisitas menggunakan ProTox-3.0 pada Tabel 3, dari empat senyawa yang diuji, dua senyawa masuk dalam kategori toksisitas kelas III dengan nilai LD50 sebesar 159 mg/kg, yang menunjukkan bahwa ≤ 300 menimbulkan beracun jika ditelan. Sementara itu, satu senyawa berada pada kelas IV dengan nilai LD50 di atas 900 mg/kg, yang menurut ProTox, senyawa tersebut dapat menimbulkan bahaya apabila tertelan.

Tabel 3. Hasil Uji Toksisitas

Senyawa	Predicted LD50	Toxicity class
Morin	3919mg/kg	V
Myricetin	159mg/kg	III
Vitexin	832mg/kg	IV
Isovitexin	159mg/kg	III

Satu senyawa lainnya termasuk dalam kelas V dengan nilai LD50 sebesar 3919 mg/kg, yang menunjukkan bahwa senyawa tersebut bersifat tidak beracun atau memiliki tingkat toksisitas yang sangat rendah. LD50 atau lethal dose 50%, sebagaimana dijelaskan oleh Paramveer et al. (2010), merupakan salah satu indikator penting dalam kajian toksikologi karena menggambarkan jumlah zat yang dapat menyebabkan kematian pada 50% populasi hewan percobaan. Nilai ini umumnya digunakan untuk menilai tingkat toksisitas akut suatu senyawa, termasuk dalam pengembangan dan evaluasi keamanan obat. Ekstrak daun binahong berdasarkan penelitian ini batas konsumsi tidak berlebihan dan sebaiknya dikonsumsi dua kali sehari dengan merebus 1 sampai 2 lembar daun binahong dengan 2 gelas air hingga mendidih. Penelitian ini mendukung penelitian sebelumnya bahwa masyarakat Kemukiman Bambi menggunakan daun binahong untuk obat tradisional sebagai antidiabetes.

SIMPULAN

Pada daun binahong ditemukan 4 senyawa yang berpotensi sebagai antidiabetes antara lain morin, myricetin, vitexin, dan isovitexin. Salah satu senyawa tersebut memenuhi aturan lipinski. Indikator ADMET senyawa Morin memiliki kemampuan penyerapan paling tinggi di

sistem pencernaan diantara keempat senyawa yang lain, dan keempat senyawa tersebut tidak berpengaruh terhadap sawar darah otak pusat (BBB). Terdapat CYP 2C9 Inhibitor dapat dikatakan keempat senyawa dapat dimetabolisme sangat baik oleh tubuh. Senyawa Morin menunjukkan kelas kelas V yang artinya senyawa tersebut bersifat tidak beracun atau memiliki tingkat toksisitas yang sangat rendah.

DAFTAR RUJUKAN

- Astuti, S. M. (2011). Skrining fitokimia dan uji aktifitas antibiotika ekstrak etanol daun, batang, bunga, dan umbi tanaman binahong.
- Barat, J., Cirebon, K., & Barat, J. (2022). Kandungan Daun Binahong (*Anredera cordifolia*) sebagai Obat Diabetes Mellitus. I, 33–38.
- Dewi, E., Agustina, R., & Husna, M. (2020). Studi Etnomorfologi Tanaman Binahong (*Anredera cordifolia*) Di Pemukiman di Kabupaten Pidie Sebagai Upaya Swamedikasi. Jurnal Real Riset, 2(3), 27–28.
- Kim, E., Kim, S., Ha, S., & Nam, H. (2015, October). Toxicity Predictions using Compound Descriptions. In Proceedings of the ACM Ninth International Workshop on Data and Text Mining in Biomedical Informatics (pp. 21–21). Coimbra, J. T., Feghali, R., Ribeiro, R. P., Ramos, M. J., &
- Makalalag, I. W., & Wullur, A. (2013). Uji ekstrak daun binahong (*Anredera cordifolia* Steen.) terhadap kadar gula darah pada tikus putih jantan galur Wistar (*Rattus norvegicus*) yang diinduksi sukrosa. *Pharmakon*, 2(1).
- Mulia, R., Setiawan, A., & Rahmawati, R. (2023). Analisis In Silico Potensi Senyawa Aktif Daun Binahong sebagai Inhibitor Aldosa Reduktase. Jurnal Bioinformatika dan Bioteknologi, 11(1), 45–55.
- Paramveer, S. D., Chanchal, K. M., Mavani Pares, M. P., Asha Rani, A. R., Shrivastava, B., & Nema, R. K. (2010). Effective alternative methods of LD50 help to save number of experimental animals.
- Rahmi Agustina, E. D. (2019). KEARIFAN LOKAL MASYARAKAT KEMUKIMAN BAMBIL DALAM MENGOLAH TANAMAN BINAHONG (*Anredera cordifolia*) SEBAGAI TANAMAN OBAT. Jurnal Agroristik, 2(1), 24–29.
- Rohaeni, E. S., Widiawati, Y., Setiasih, Bakrie, B., Wardi, Anggraeny, Y. N., Hatta, M., Shiddieqy, M. I., Ahmad, S. N., Widodo, S., Firsoni, Evvyernie, D., & Yolanda, D. E. (2024). The utilization of Binahong leaves as medicinal plants for livestock production and health. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 1312(1).
- Shofi, M. (2021). Uji In Silico Aktivitas Sitotoksik dan Toksisitas Senyawa Bioaktif Biji Trembesi (*Samanea saman* (Jacq.) Merr) Sebagai Kandidat Obat Diabetes Mellitus. Jurnal Pharma Bhakta, 1(2).
- Song, Y., Li, C., Liu, G., Liu, R., Chen, Y., Li, W., ... & Liu, Y. (2021). Drug-metabolizing cytochrome P450 enzymes have multifarious influences on treatment outcomes. Clinical pharmacokinetics, 60(5), 585–601.
- Vélez, L. A., Delgado, Y., Ferrer-Acosta, Y., Suárez-Arroyo, I. J., Rodríguez, P., & Pérez, D. (2022). Theoretical prediction of gastrointestinal absorption of phytochemicals. International Journal of Plant Biology, 13(2), 163–179.
- Zhao, M., Ma, J., Li, M., Zhang, Y., Jiang, B., Zhao, X., ... & Qin, S. (2021). Cytochrome P450 enzymes and drug metabolism in humans. International journal of molecular sciences, 22(23), 12808.