

TINJAUAN LITERATUR : PENGGUNAAN MOLECULAR DOCKING DALAM IDENTIFIKASI SENYAWA POTENSIAL SEBAGAI AGEN ANTIDIABETES

Nauval Aqil Hidayah¹, Saeful Amin²

Universitas Bakti Tunas Husada^{1,2}

aqilnauval4@gmail.com

Received: 13-05-2025

Revised: 23-05-2025

Approved: 29-05-2025

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji penerapan metode *molecular docking* dalam identifikasi senyawa potensial sebagai agen antidiabetes dari berbagai sumber alami. Metode penelitian yang digunakan adalah tinjauan pustaka (*literature review*) terhadap artikel yang dipublikasikan antara tahun 2020 hingga 2025, dengan fokus pada senyawa yang diteliti melalui pendekatan *molecular docking* terhadap target-target protein seperti α -glukosidase, DPP-IV, PPAR- γ , α -amilase, dan glukokinase. Hasil penelitian menunjukkan bahwa beberapa senyawa seperti Apigenin-7-O-glukosida, Andrographolide, dan Pyro pheophorbide a memiliki afinitas ikatan yang tinggi terhadap target enzim terkait regulasi glukosa darah. Simpulan dari kajian ini menunjukkan bahwa *molecular docking* merupakan pendekatan komputasional yang efektif dalam tahap awal penemuan obat antidiabetes, meskipun validasi lebih lanjut secara *in vitro*, *in vivo*, dan uji klinis tetap diperlukan untuk memastikan efektivitas dan keamanannya.

Kata Kunci : *Molecular Docking, Senyawa Antidiabetes, A-Glukosidase, DPP-IV, PPAR- γ*

PENDAHULUAN

Diabetes mellitus (DM) merupakan salah satu penyakit metabolik kronis yang ditandai oleh meningkatnya kadar gula darah sebagai akibat dari gangguan sekresi atau kerja hormon insulin. Insulin berfungsi mengatur keseimbangan glukosa dalam darah dengan membantu transportasi glukosa ke dalam sel-sel tubuh untuk digunakan sebagai energi. Ketika produksi insulin menurun atau respons tubuh terhadap insulin terganggu, glukosa akan menumpuk dalam sirkulasi darah dan menimbulkan kondisi hiperglikemia. Jika tidak dikendalikan, kondisi ini dapat menyebabkan komplikasi jangka panjang yang serius, termasuk kerusakan ginjal, gangguan saraf, gangguan penglihatan, hingga penyakit jantung dan stroke (Prasetyo et al., 2024).

Menurut penelitian terbaru yang dilakukan oleh (Vijh & Gupta, 2024) mengidentifikasi 18 senyawa dengan potensi antidiabetes melalui analisis GC-MS dan *in silico* ADMET, serta mengevaluasi interaksi mereka dengan target seperti α -amilase, α -glukosidase, dan DPP-4. Meskipun berbagai senyawa telah diteliti sebagai kandidat agen antidiabetes, masih terdapat kebutuhan untuk mengidentifikasi senyawa baru yang lebih efektif dan aman. Penggunaan *molecular docking* sebagai alat prediktif dalam tahap awal penemuan obat menawarkan potensi besar dalam menyaring dan mengevaluasi senyawa kandidat. Namun, diperlukan kajian lebih lanjut untuk menilai efektivitas metode ini dalam mengidentifikasi senyawa dengan afinitas tinggi terhadap target protein terkait DM (Tariq et al., 2023). Prevalensi DM di seluruh dunia mengalami peningkatan yang signifikan dari tahun ke tahun. Berdasarkan laporan dari World Health Organization (2021), lebih dari 460 juta orang tercatat menderita diabetes pada tahun 2019, dan jumlah tersebut diperkirakan akan terus bertambah. Di Indonesia sendiri, diabetes merupakan salah satu penyakit tidak menular dengan tingkat pertumbuhan yang tinggi, menjadi beban besar bagi sistem pelayanan kesehatan. Oleh sebab itu, upaya untuk mengembangkan strategi pengelolaan yang

lebih efektif dan berkelanjutan sangatlah penting (Aziz & Zakir, 2022).

Meskipun berbagai bentuk terapi konvensional telah tersedia, seperti injeksi insulin dan obat antidiabetes oral, efektivitasnya belum mencakup seluruh spektrum jenis diabetes, terutama tipe 2 yang dipengaruhi oleh resistensi insulin. Selain itu, efek samping seperti hipoglikemia, gangguan pencernaan, dan peningkatan berat badan sering kali menjadi kendala dalam penggunaan jangka Panjang (Kim, 2024). Oleh karena itu, diperlukan alternatif terapi yang lebih selektif, aman, dan memiliki efektivitas yang tinggi. Berbagai senyawa bioaktif, baik yang berasal dari alam seperti tumbuhan obat maupun hasil sintesis laboratorium, kini menjadi fokus utama dalam pengembangan agen antidiabetes baru. Senyawa-senyawa tersebut bekerja dengan cara menghambat aktivitas enzim-enzim kunci dalam metabolisme glukosa, seperti α -glukosidase yang berperan dalam pencernaan karbohidrat, PTP1B yang berfungsi mengatur jalur sinyal insulin, serta PPAR- γ yang terlibat dalam pengaturan metabolisme lipid dan glukosa. Inhibisi terhadap enzim-enzim ini diyakini dapat meningkatkan kontrol glikemik dan sensitivitas insulin pada penderita diabetes (I. Amin et al., 2025).

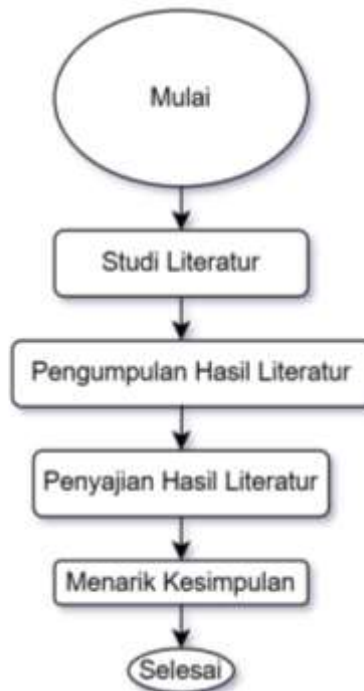
Salah satu pendekatan yang banyak digunakan dalam penapisan senyawa bioaktif adalah metode *molecular docking*, yaitu simulasi komputasional yang digunakan untuk memprediksi interaksi antara ligan (senyawa aktif) dengan reseptor target (protein). Teknik ini memungkinkan peneliti untuk mengevaluasi afinitas ikatan, orientasi molekuler, serta kemungkinan mekanisme kerja senyawa terhadap target enzim. Penggunaan *molecular docking* dinilai efisien karena dapat menyaring ratusan hingga ribuan kandidat senyawa sebelum dilakukan uji eksperimental lanjutan. Pendekatan ini telah banyak diterapkan dalam studi-studi terkini yang mengeksplorasi senyawa dari tanaman obat dan produk alami lainnya untuk pengembangan terapi antidiabetes (S. Amin, Aulia, et al., 2025). Walaupun berbagai obat sudah tersedia, kebutuhan akan terapi baru yang lebih selektif dan minim efek samping masih sangat tinggi.

Kemajuan di bidang bioinformatika dan pemodelan struktur protein memungkinkan *molecular docking* menjadi metode kunci dalam eksplorasi dan desain obat baru. Dengan teknik ini, peneliti dapat memahami lebih dalam tentang interaksi antara senyawa dan protein target yang berperan dalam patogenesis diabetes, sehingga dapat mengidentifikasi senyawa kandidat dengan potensi farmakologis tinggi. Melalui tinjauan pustaka ini, akan dibahas secara mendalam mengenai penggunaan *molecular docking* dalam mengidentifikasi senyawa potensial sebagai agen antidiabetes, khususnya yang menargetkan enzim-enzim utama dalam jalur metabolik glukosa. Harapannya, kajian ini dapat memberikan kontribusi dalam upaya pengembangan terapi diabetes yang lebih efektif dan aman di masa mendatang (S. Amin & Putri, 2025).

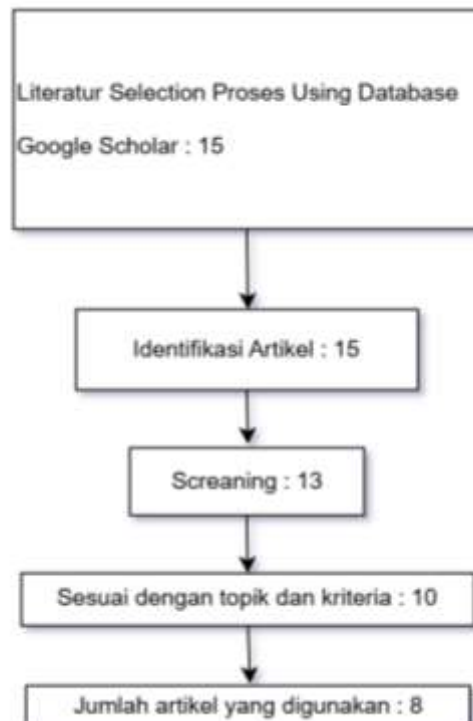
METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan metode *literature review* untuk mengkaji penerapan *molecular docking* dalam identifikasi senyawa antidiabetes. Data diperoleh dari basis data ilmiah seperti Google Scholar, PubMed, ScienceDirect, dan Scopus menggunakan kata kunci terkait diabetes dan target enzim seperti α -glukosidase, DPP-IV, dan PPAR- γ . Artikel yang dipilih adalah publikasi berbahasa Indonesia atau Inggris antara tahun 2020–2025 yang memuat hasil *docking* serta nilai afinitas ikatan (ΔG). Artikel yang tidak relevan atau tidak memuat data molekuler dikeluarkan. Data yang terkumpul dianalisis untuk mengidentifikasi senyawa yang menunjukkan potensi sebagai agen

antidiabetes dan menilai kontribusi metode *molecular docking* dalam tahap awal penemuan obat.



Gambar 1. Alur Penelitian



Gambar 2. Flowchart pencarian literatur

HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

Dari hasil penelaahan terhadap sejumlah artikel yang diperoleh, teridentifikasi

beberapa studi yang mengkaji pemodelan molecular docking terhadap senyawa-senyawa yang berpotensi sebagai agen Anti-diabetes. Rangkuman dari hasil tinjauan literatur tersebut disajikan pada Tabel 1.

Tabel 1.
Hasil tinjauan literatur

No	Metode	Senyawa	Reseptor	PDB	Energi Ikatan Bebas (kcal/mol)	Referensi
1.	Molecular Docking	Apenin-7-O-glukosida	α -Glukosidas e	3TOP	-38,28	(Ahmed et al., 2022)
2.	Molecular Docking	Chrysin	α -Amilase	4W93	-8,1	(Bitew et al., 2021)
3.	Molecular Docking	Serpentine	DPP-IV	6B1E	-7,90	(Rendi et al., 2021)
4.	Molecular Docking	Abscisic Acid (ABA)	PPAR- γ	3DZY	-7,3	(Ashraf et al., 2021)
5.	Molecular Docking	Naringenin	α -Glukosidas e	3TOP	-7,5	(Olaokun et al., 2022)
6.	Molecular Docking	Andrographolide	Glukokinase	1V4S	-12,1	(Ab Rahman et al., 2020)
7.	Molecular Docking	Pyropheophorbide a	DPP-IV	1J2E	-9,4	(A. & DE, 2024)
8.	Molecularr Docking	Isosteviol	PPAR- γ	3DZY	-8,89	(S. Amin, Fauziah, et al., 2025)

Berdasarkan data dalam Tabel 1, dapat diidentifikasi delapan senyawa yang menunjukkan potensi signifikan sebagai agen antidiabetes, melalui interaksi molekuler dengan berbagai target protein penting yang terlibat dalam regulasi kadar glukosa darah. Target-target ini meliputi enzim pemecah karbohidrat seperti α -glukosidase dan α -amilase, enzim pemecah hormon inkretin (DPP-IV), reseptor nuklir PPAR- γ , serta glukokinase yang berperan dalam metabolisme glukosa hepatic. Apigenin-7-O-glukosida tercatat memiliki nilai energi ikatan bebas paling rendah ($\Delta G = -38,28$ kcal/mol) terhadap α -glukosidase (PDB ID: 3TOP), berdasarkan hasil simulasi yang dilaporkan oleh (Ahmed et al., 2022). Nilai ini menunjukkan afinitas yang sangat tinggi, menjadikan senyawa ini sebagai kandidat inhibitor α -glukosidase yang menjanjikan. Penghambatan terhadap enzim ini dapat memperlambat hidrolisis karbohidrat menjadi glukosa di usus halus, sehingga menekan lonjakan glukosa pascamakan (Amal et al., 2025).

Senyawa chrysin, flavonoid alami, juga menunjukkan afinitas yang kuat terhadap α -amilase ($\Delta G = -8,1$ kcal/mol; PDB ID: 4W93), yang mendukung mekanisme kerja serupa dalam menghambat pencernaan karbohidrat (Bitew et al., 2021). Naringenin, flavonoid lain yang banyak ditemukan dalam buah citrus, berinteraksi dengan α -glukosidase dengan ΔG sebesar $-7,5$ kcal/mol (Olaokun et al., 2022), memperkuat temuan bahwa flavonoid memiliki potensi antidiabetes melalui jalur penghambatan

enzim pencernaan. Selain enzim-enzim pencernaan, target lain yang tak kalah penting adalah Dipeptidyl Peptidase-IV (DPP-IV), enzim yang bertanggung jawab atas degradasi hormon inkretin seperti GLP-1. Inkretin berperan dalam meningkatkan sekresi insulin pasca konsumsi makanan, sehingga penghambatan DPP-IV memungkinkan perpanjangan aktivitas hormon tersebut. Serpentine, senyawa alkaloid, tercatat memiliki ΔG $-7,90$ kcal/mol terhadap DPP-IV (PDB ID: 6B1E) (Rendi et al., 2021), sementara Pyropheophorbide a menunjukkan ikatan lebih kuat ($\Delta G = -9,4$ kcal/mol; PDB ID: 1J2E), memperlihatkan potensi keduanya dalam meningkatkan kadar GLP-1 aktif (A. & DE, 2024). Di sisi lain, senyawa Abscisic Acid (ABA) dan Isosteviol berfungsi sebagai agonis terhadap PPAR- γ , yaitu reseptor nuklir yang memainkan peran penting dalam regulasi metabolisme lipid dan sensitivitas insulin. ABA menunjukkan afinitas dengan ΔG $-7,3$ kcal/mol (3DZY), sementara Isosteviol memiliki nilai ikatan lebih rendah sebesar $-8,89$ kcal/mol, menunjukkan potensinya dalam meningkatkan fungsi metabolik secara keseluruhan (S. Amin, Fauziah, et al., 2025).

Salah satu temuan paling menonjol dalam studi molecular docking adalah potensi senyawa Andrographolide, suatu diterpenoid lakton yang diisolasi dari tanaman obat *Andrographis paniculata*, dalam berinteraksi kuat dengan enzim glukokinase. Berdasarkan hasil simulasi docking terhadap struktur protein glukokinase dengan PDB ID: 1V4S, diketahui bahwa Andrographolide menunjukkan energi ikatan bebas (ΔG) sebesar $-12,1$ kcal/mol, yang tergolong sangat rendah dan menandakan afinitas ikatan yang tinggi terhadap situs aktif enzim tersebut (Ab Rahman et al., 2020). Nilai ini bahkan lebih kompetitif dibandingkan dengan beberapa aktivator glukokinase sintetik yang telah dikembangkan dalam penelitian terdahulu, menjadikan senyawa ini kandidat menjanjikan dalam modulasi metabolisme glukosa.

Glukokinase (GK), juga dikenal sebagai hexokinase IV, merupakan enzim kunci yang terdapat di hati dan pankreas, serta berfungsi mengkatalisis fosforilasi glukosa menjadi glukosa-6-fosfat sebagai tahap awal dalam jalur glikolisis. Dalam sel hati, glukokinase bertindak sebagai sensor glukosa yang sangat penting dalam menjaga homeostasis glukosa sistemik. Aktivasi enzim ini meningkatkan ambilan glukosa dari darah dan mengarah pada peningkatan penyimpanan glikogen, serta menurunkan kadar glukosa darah postprandial. Tidak seperti hexokinase lain, glukokinase memiliki afiliasi rendah terhadap glukosa tetapi kapasitas tinggi, yang memungkinkannya berperan efektif saat kadar glukosa tinggi, seperti setelah makan (Ab Rahman et al., 2020).

Keistimewaan dari strategi aktivasi glukokinase terletak pada mekanisme kerjanya yang tidak tergantung pada peningkatan sekresi insulin ataupun penghambatan enzim pencernaan karbohidrat. Sebaliknya, aktivator glukokinase secara langsung meningkatkan utilisasi glukosa oleh hati, yang menjadikannya terapi alternatif potensial, terutama untuk pasien dengan resistensi insulin. Dalam hal ini, Andrographolide dapat menawarkan efek hipoglikemik langsung, berbeda dari mekanisme inhibitor seperti α -glukosidase atau DPP-IV, yang lebih fokus pada penyerapan atau regulasi hormon (Ab Rahman et al., 2020). Studi lain juga menunjukkan bahwa Andrographolide memiliki berbagai aktivitas biologis tambahan, seperti antiinflamasi, antioksidan, dan imunomodulator, yang sangat relevan dalam konteks diabetes mellitus tipe 2, di mana peradangan kronis tingkat rendah dan stres oksidatif turut memperburuk resistensi insulin dan disfungsi β -sel pankreas. Dengan demikian, aktivitas Andrographolide terhadap glukokinase tidak hanya memberikan manfaat dalam pengendalian kadar glukosa darah, tetapi juga berpotensi memperbaiki

lingkungan metabolik secara keseluruhan (Saka et al., 2024).

Ragam mekanisme aksi dari masing-masing senyawa yang ditinjau menunjukkan pendekatan multi-target yang lebih menjanjikan dalam pengelolaan diabetes mellitus dibandingkan terapi tunggal konvensional. Penghambatan simultan terhadap enzim pemecah karbohidrat, peningkatan hormon insulinogenik, serta aktivasi reseptor nuklir dan enzim hepatik memberikan sinergi yang berpotensi menghasilkan kontrol glikemik yang lebih stabil. Misalnya, selain meningkatkan sensitivitas insulin, aktivasi PPAR- γ oleh senyawa seperti ABA dan Isosteviol juga membantu memperbaiki profil lipid dan menekan peradangan metabolik yang sering menyertai hiperglikemia kronis (Sari & Sarifah, 2024). Pendekatan ini tidak hanya menargetkan satu jalur metabolik, melainkan merancang intervensi yang menyeluruh terhadap sistem metabolisme tubuh. Namun, meskipun hasil *in silico* menunjukkan potensi besar, validasi lebih lanjut melalui studi *in vitro*, *in vivo*, serta uji klinis sangat diperlukan untuk memastikan efektivitas, bioavailabilitas, dan keamanan senyawa-senyawa tersebut sebelum dapat diterapkan dalam terapi klinis (Elsiana et al., 2023).

KESIMPULAN

Bahwa teknik *molecular docking* merupakan pendekatan komputasional yang efektif dalam mengidentifikasi senyawa potensial sebagai agen antidiabetes, khususnya yang berasal dari sumber alami. Berbagai studi menunjukkan bahwa senyawa seperti Apigenin-7-O-glukosida, Andrographolide, dan Pyro pheophorbide a memiliki afinitas pengikatan yang baik terhadap enzim-enzim kunci seperti α -glukosidase, DPP-IV, dan PPAR- γ . Hal ini menunjukkan bahwa *molecular docking* mampu memprediksi potensi aktivitas biologis senyawa terhadap target protein secara efisien. Meski demikian, prediksi ini tetap memerlukan validasi lebih lanjut melalui uji laboratorium dan klinis guna memastikan efektivitas dan keamanannya.

DAFTAR PUSTAKA

- A., M., & DE, S. (2024). Integrating in silico molecular docking, ADMET analysis of *C.verticillata* with diabetic markers and in vitro anti-inflammatory activity. *Future Journal of Pharmaceutical Sciences*, 10(1). <https://doi.org/10.1186/s43094-023-00576-z>
- Ab Rahman, N. S., Abdul Majid, F. A., Abd Wahid, M. E., Ismail, H. F., Tap, F. M., Zainudin, A. N., Zainol, S. N., & Mohammad, M. A. (2020). Molecular docking analysis and anti-hyperglycaemic activity of SynacinnTM in streptozotocin-induced rats. *RSC Advances*, 10(57), 34581–34594. <https://doi.org/10.1039/d0ra04664g>
- Ahmed, S., Ali, M. C., Ruma, R. A., Mahmud, S., Paul, G. K., Saleh, M. A., Alshahrani, M. M., Obaidullah, A. J., Biswas, S. K., Rahman, M. M., Rahman, M. M., & Islam, M. R. (2022). Molecular Docking and Dynamics Simulation of Natural Compounds from Betel Leaves (*Piper betle* L.) for Investigating the Potential Inhibition of Alpha-Amylase and Alpha-Glucosidase of Type 2 Diabetes. *Molecules*, 27(14), 1–19. <https://doi.org/10.3390/molecules27144526>
- Amal, I. I., Hayati, A. N., Biologi, P. S., Sains, F., Islam, U., Sunan, N., Yogyakarta, K., Adisucipto, J. L., & Yogyakarta, D. I. (2025). *UJI SENYAWA INHIBITOR AMILASE DARI TEMPUYUNG (Sonchus arvensis) SEBAGAI ANTI DIABETES SECARA IN SILICO*. 5(1), 7–14.
- Amin, I., Muhammad, Huda, & Sabilul. (2025). *Review Artikel: Pendekatan Molecular Docking dalam Penemuan Senyawa Alami sebagai Penghambat Enzim Diabetes*

- Tipe 2.* 2(1), 1407–1411.
- Amin, S., Aulia, M., Anjani, P. T., & Leandra, D. N. (2025). *Literature Review : Pendekatan In Silico Potensi Senyawa dalam Daun Kelor (Moringa oleifera L .) sebagai Kandidat Antidiabetes.* 5(1), 91–101.
- Amin, S., Fauziah, G., Putri, N. A., & Azizah, F. (2025). *Journal of Innovative and Creativity Analisis In Silico Senyawa Bioaktif Kulit Buah Manggis (Garcinia mangostana L .) sebagai Kandidat Inhibitor Enzim Diabetes Tipe 2.* *Journal of Innovative and Creativity*, 4(1), 240–245.
<https://doi.org/https://doi.org/10.31004/joecy.v5i2.165>
- Amin, S., & Putri, A. C. (2025). *Studi Literatur : Sintesis dan Karakterisasi Senyawa Turunan Baru dengan Aktivitas Antidiabetes yang Lebih Unggul.* 5(3), 1–16.
- Ashraf, S. A., Elkhalfa, A. E. O., Mehmood, K., & Adnan, M. (2021). *Acid Targeting Signaling Proteins Involved in the Development of Diabetes.* *Molecules*, 26(19), 1–23.
- Aziz, A., & Zakir, S. (2022). *Indonesian Research Journal on Education : Jurnal Ilmu Pendidikan.* 2(3), 1030–1037.
- Bitew, M., Desalegn, T., Demissie, T. B., Belayneh, A., Endale, M., & Eswaramoorthy, R. (2021). *Pharmacokinetics and drug-likeness of antidiabetic flavonoids: Molecular docking and DFT study.* *PLoS ONE*, 16(12 December).
<https://doi.org/10.1371/journal.pone.0260853>
- Elsiana, I., Ulum, K., Kurnia, K. A., Widyatamaka, S. Q., & Paujiah, S. (2023). *Review Artikel: Docking Molekuler Obat Anti Diabetes Melitus.* *Journal of Pharmaceutical and Sciences*, 6(2), 541–554. <https://doi.org/10.36490/journal-jps.com.v6i2.41>
- Kim, H. S. (2024). *Ideal Combination of Oral Hypoglycemic Agents for Patients with Type 2 Diabetes Mellitus.* 882–884.
- Olaokun, O. O., Manonga, S. A., Zubair, M. S., Maulana, S., & Mkolo, N. M. (2022). *Molecular Docking and Molecular Dynamics Studies of Antidiabetic Phenolic Compound Isolated from Leaf Extract of Englerophytum magalismontanum (Sond.) T.D.Penn.* *Molecules*, 27(10).
<https://doi.org/10.3390/molecules27103175>
- Prasetyo, A., Mumpuni, E., Rahmadhani, S. H., & Amin, S. (2024). *Studi In Silico Senyawa Bioaktif pada Dan Yakon (Smallanthus sonchifolius) , Kayu Secang (Caesalpinia sappan L .) , Daun Salam (Syzygium polyanthum) Sebagai Antidiabetes Mekanisme Kerja Inhibitor SGLT-2.* 6(2), 72–85.
<https://doi.org/10.15408/pbsj.v6i2.39508>
- Rendi, I. P., Maranata, G. J., Chaerunisa, H., Nugrahaeni, N., & Alfathonah, S. S. (2021). *Molecular Docking of Compounds in Moringa oleifera Lam with Dipeptidyl Peptidase-4 Receptors as Antidiabetic Candidates.* *Jurnal Farmasi Dan Ilmu Kefarmasian Indonesia*, 8(3), 242. <https://doi.org/10.20473/jfiki.v8i32021.242-249>
- Saka, W. A., Oyekunle, O. S., Akhigbe, T. M., Oladipo, O. O., Ajayi, M. B., Adekola, A. T., Omole, A. I., & Akhigbe, R. E. (2024). *Andrographis paniculata improves glucose regulation by enhancing insulin sensitivity and upregulating GLUT 4 expression in Wistar rats.* *Frontiers in Nutrition*, 11(October), 1–13.
<https://doi.org/10.3389/fnut.2024.1416641>
- Sari, D. R. T., & Sarifah, L. (2024). *Siphonaxanthin, Keto-Karoteonid Alga Hijau, Kandidat Potensial Antidiabetes.* *Spizaetus: Jurnal Biologi Dan Pendidikan Biologi*, 5(2), 174. <https://doi.org/10.55241/spibio.v5i2.370>

- Tariq, H. Z., Saeed, A., Ullah, S., Fatima, N., Halim, S. A., Khan, A., El-Seedi, H. R., Ashraf, M. Z., Latif, M., & Al-Harrasi, A. (2023). Synthesis of novel coumarin-hydrazone hybrids as α -glucosidase inhibitors and their molecular docking studies. *RSC Advances*, *13*(37), 26229–26238. <https://doi.org/10.1039/d3ra03953f>
- Vijh, D., & Gupta, P. (2024). GC-MS analysis, molecular docking, and pharmacokinetic studies on Dalbergia sissoo barks extracts for compounds with anti-diabetic potential. *Scientific Reports*, *14*(1), 24936. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-75570-3>