

Studi in silico kandungan senyawa acetogenin pada daun sirsak sebagai Inhibitor SGLT2 untuk terapi diabetes melitus Tipe 2 = In silico study of acetogenin compound in soursop leaves as SGLT2 Inhibitor for type 2 diabetes mellitus therapy

Thalia Kaylyn Averil, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920565642&lokasi=lokal>

Abstrak

Latar Belakang

Diabetes melitus merupakan kelainan metabolisme yang ditandai dengan peningkatan kadar glukosa darah yang memiliki dua sub tipe, yaitu DMT1 dan DMT2. Salah satu tata laksana farmakologi terbaru untuk DMT2 adalah inhibitor SGLT2 yang bekerja dengan menghambat protein SGLT2. Saat ini, penelitian-penelitian dilakukan untuk menemukan senyawa baru yang dapat bertindak sebagai inhibitor SGLT2 dari bahan alam, tetapi masih memiliki beberapa kekurangan. Daun sirsak (*Annona muricata* L) telah diidentifikasi mengandung berbagai senyawa bioaktif yang memiliki kemampuan untuk menurunkan kadar glukosa darah, terutama acetogenin. Oleh karena itu, penelitian ini dilakukan untuk mengetahui potensi senyawa acetogenin pada daun sirsak sebagai alternatif inhibitor SGLT2.

Metode

Penelitian ini menggunakan metode penelitian analitik observasional secara in silico dengan perangkat lunak DataWarrior untuk memprediksi nilai IC50 dan Molegro Virtual Docker untuk molecular docking.

Hasil

Seluruh senyawa acetogenin daun sirsak termasuk ke dalam kriteria “good activity” berdasarkan hasil prediksi nilai IC50. Tiga senyawa dengan nilai IC50 yang paling rendah adalah annohexocin (8.929 M), murihexocin (8.71 M), dan montanacin D (8.977 M). Montanacin D memiliki rerank score paling negatif pada molecular docking antara protein 7VSI dengan senyawa terpilih (-147.99), sedangkan montanacin D memiliki rerank score paling tidak negatif pada molecular docking menggunakan protein 7WMV (-34.7753).

Kesimpulan

Seluruh senyawa acetogenin daun sirsak memiliki aktivitas penghambatan yang kuat terhadap SGLT2. Berdasarkan molecular docking, senyawa acetogenin daun sirsak berpotensi untuk menjadi alternatif inhibitor SGLT2 dengan montanacin D sebagai senyawa dengan potensi terbaik karena dapat berinteraksi dengan kuat pada situs aktif protein SGLT2 yang ditunjukkan dengan rerank score yang rendah.

.....Introduction

Diabetes mellitus is a metabolic disorder characterized by increased blood glucose levels that have two subtypes, namely DMT1 and DMT2. One of the latest pharmacological treatments for DMT2 is the SGLT2 inhibitor which works by inhibiting the SGLT2 protein. Currently, studies are being conducted to find new compounds that can act as SGLT2 inhibitors from natural ingredients, but still have some shortcomings. Soursop leaves (*Annona muricata* L) have been identified as containing various bioactive compounds that have the ability to lower blood glucose levels, especially acetogenin. Therefore, this study was conducted to determine the potential of acetogenin compounds in soursop leaves as an alternative SGLT2 inhibitor.

Method

This study used an in silico observational analytical research method with DataWarrior software to predict IC50 values and Molegro Virtual Docker for molecular docking. Results

All acetogenin compounds of soursop leaves are included in the criteria of “good activity” based on the results of the predicted IC50 values. The three compounds with the lowest IC50 values are annohexocin (8.929 M), murihexocin (8.71 M), and montanacin D (8.977 M). Montanacin D has the most negative rerank score in molecular docking between 7VSI protein and selected compounds (-147.99), while montanacin D has the least negative rerank score in molecular docking using 7WMV protein (-34.7753). Conclusion All acetogenin compounds of soursop leaves have strong inhibitory activity against SGLT2. Based on molecular docking, acetogenin compounds of soursop leaves have the potential to be an alternative SGLT2 inhibitor with montanacin D as the compound with the best potential because it can interact strongly at the active site of SGLT2 protein as indicated by a low rerank score.