

Studi In Silico senyawa syzygium aromaticum sebagai inhibitor SGLT2 untuk terapi diabetes melitus tipe 2 = In Silico study of syzygium aromaticum compounds as SGLT2 inhibitor for type 2 diabetes melitus therapy

Andhika Alwan Rasyhad, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920565878&lokasi=lokal>

Abstrak

Latar Belakang

Diabetes Melitus (DM) merupakan penyebab kematian terbesar ke-3 di Indonesia. Terdapat berbagai opsi pengobatan diabetes Melitus, salah satunya golongan inhibitor SGLT2. Bunga cengkeh atau *Syzygium aromaticum* sebagai spesies tumbuhan yang umum digunakan sebagai obat herbal, memiliki senyawa dengan aktivitas down regulation SGLT dan GLUT2. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui efek antidiabetes senyawa *Syzygium aromaticum* dengan aktivitas inhibitor SGLT2 secara in silico menggunakan prediksi nilai IC50 dan molecular docking.

Metode

Penelitian analitik observasional in silico menggunakan metode prediksi nilai IC50 dengan perangkat lunak DataWarrior dan molecular docking dengan perangkat lunak Molegro Virtual Docker (MVD).

Hasil

Senyawa yang terdapat dalam *Syzygium aromaticum* memiliki aktivitas inhibitor SGLT2 melalui prediksi nilai IC50. Tiga senyawa yang dipilih karena memiliki potensi inhibitor SGLT2 adalah Astilbin, HPEA, dan Strictinin (IC50: 3,2 M; 31,189 M; 0,315 M) Ketiga senyawa memiliki nilai IC50 dengan kategori excellent, good, dan moderate activity serta nilai LELP mendekati 6. Validasi molecular docking dengan protein SGLT2 (7VSI) menunjukkan ketiga senyawa Rerank Score negatif, mengindikasikan ikatan yang spontan dan kuat. Selain itu, Strictinin memiliki nilai Rerank Score positif terhadap protein SGLT1, mengindikasikan selektivitas yang rendah terhadap protein tersebut.

Kesimpulan

Terdapat aktivitas inhibitor SGLT2 pada senyawa *Syzygium aromaticum* untuk senyawa Astilbin, HPEA, dan Strictinin. Senyawa tersebut memiliki selektivitas tinggi terhadap protein SGLT2. Strictinin memiliki selektivitas rendah terhadap protein SGLT1, sehingga berpotensi untuk terapi antidiabetes dengan efek samping minimal.

.....

Introduction

Diabetes Melitus (DM) is the third leading cause of death in Indonesia. There are various treatment options for diabetes Melitus, one of which is the SGLT2 inhibitor class. Clove flower or *Syzygium aromaticum* is a plant species commonly used as an herbal medicine, contains compounds that exhibit downregulation of SGLT and GLUT2. This study aims to investigate the antidiabetic effects of compounds in *Syzygium aromaticum* with SGLT2 inhibitory activity in silico using IC50 prediction and molecular docking.

Method

This observational analytic in silico study used the IC50 value prediction method with DataWarrior software and molecular docking with Molegro Virtual Docker (MVD) software.

Results

The compounds found in *Syzygium aromaticum* exhibited SGLT2 inhibitory activity through IC₅₀ value prediction. Three compounds identified as having SGLT2 inhibitor potential were Astilbin, HPEA, and Strictinin (IC₅₀: 3,2 M; 31,189 M; 0,315 M). These compounds had IC₅₀ values classified as excellent, good, and moderate activity, with LELP values approaching 6. Upon validation of molecular docking with the SGLT2 protein (7VSI), all three compounds showed negative Rerank Scores, indicating strong and spontaneous binding. Additionally, Strictinin exhibited a positive Rerank Score with the SGLT1 protein, indicating low selectivity for that protein.

Conclusion

There is SGLT2 inhibitory activity in compounds from *Syzygium aromaticum*, specifically in Astilbin, HPEA, and Strictinin. These compounds have high selectivity for the SGLT2 protein. Strictinin shows low selectivity for the SGLT1 protein, making it a potential candidate for antidiabetic therapy with minimal side effects.