

Potensi Senyawa Triterpenoid dalam *Sauropus androgynus* L Merr sebagai Inhibitor Obesitas secara *In Silico*

Potential of Triterpenoid Compounds in *Sauropus androgynus* L. Merr as *In Silico* Inhibitor of Obesity

Wa Ode Ujiana, Maria Filestina Hiko, Lydia Efliani Coriessa Meak, Yohanes Bare

¹ Program Studi Pendidikan Biologi, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Nusa Nipa, Maumere, 86111, Indonesia

Abstrak

Obesitas atau berat badan berlebih adalah suatu penyakit yang ditandai adanya penimbunan jaringan lemak secara berlebih di dalam tubuh yang dapat memicu risiko terjadinya penyakit lain seperti hipertensi, jantung, diabetes hingga kematian. Di Provinsi Nusa Tenggara Timur (NTT) sendiri memiliki prevalensi obesitas pada penduduk umur 18 tahun keatas yakni 10,3 %. Salah satu upaya untuk mencegah obesitas dapat dilakukan dengan memanfaatkan bahan alam di Indonesia antara lain daun katuk (*Sauropus androgynus* L Merr) karena mengandung triterpenoid yang mempunyai efek antiobesitas. Tujuan penelitian ini adalah mengalisis potensi senyawa triterpenoid sebagai terapi anti diabetes secara molekuler. Senyawa Triterpenoid (CID 451674) diunduh dari *database PubChem* dan diminimalisir energi dengan perangkat lunak PyRX, Protein Lipase Pankreas diunduh dari *database PDB*. Senyawa triterpenoid diinteraksikan dengan Protein Lipase Pankreas menggunakan Hex versi 8.0.0. Protein lipase pankreas berikatan dengan senyawa triterpenoid pada tumbuhan daun katuk (*Sauropus androgynus* (L) Merr) dapat menghambat kinerja enzim lipase pankreas. Lipase memiliki manfaat dalam pemecahan trigliserida menjadi asam lemak. Yang kemudian diabsorpsi oleh usus halus dan disimpan dalam bentuk sel adiposa, dengan menghambat lipase ini menjadi alternative strategi untuk mencegah obesitas.

Kata Kunci: nti obesitas, daun katuk, obesitas, Protein Lipase Pankreas, triterpenoid
<http://dx.doi.org/10.55241/spibio.v3i2.64>

1. Pendahuluan

Obesitas atau berat badan berlebih adalah suatu penyakit yang ditandai adanya penimbunan jaringan lemak secara berlebih di dalam tubuh disebabkan oleh asupan kalori yang masuk ke dalam tubuh lebih banyak dibandingkan dengan kalori yang dikeluarkan atau digunakan dalam waktu lama (WHO, 2000). Obesitas

yang dibiarkan, dapat memicu risiko terjadinya penyakit lain seperti hipertensi, jantung, diabetes hingga kematian.

World Health Organization (WHO) menetapkan pada tahun 2016, sekitar 650 juta penduduk usia dewasa yang menderita obesitas. Kasus

obesitas di Indonesia terus mengalami peningkatan sepuluh tahun terakhir [1] Di Provinsi Nusa Tenggara Timur (NTT) sendiri memiliki prevalensi obesitas pada penduduk umur 18 tahun ke atas yakni 10,3 % (Prevalensi Obesitas Menurut Provinsi, 2018).

Salah satu upaya untuk mencegah obesitas dapat dilakukan dengan memanfaatkan bahan alam di Indonesia yang berperan sebagai antiobesitas dengan menghambat absorpsi lipid, penghambatan lipid, menurunkan kadar kolesterol total [2]–[4]. Salah satunya adalah daun katuk (*Sauropus androgynus* (L) Merr) adalah jenis tumbuhan perdu yang termaksud kedalam suku jarak-jarakan (*Euphorbiaceae*). Daun katuk merupakan tanaman yang sering digunakan oleh masyarakat Indonesia untuk pengobatan berbagai macam penyakit. Daun katuk (*Sauropus androgynus* (L.) Merr.) diketahui memiliki aktivitas antioksidan [5]. Daun katuk mengandung Senyawa kimia yaitu alkaloid, saponin, flavonoid, tanin, dan triterpenoid. Salah satu kandungan

2. Metode

Penelitian ini menggunakan kajian in silico dengan mengamati model interaksi ligand-protein. Senyawa yang terkandung dalam daun katuk (*Sauropus androgynus* L Merr) yaitu triterpenoid (CID 451674) diunduh dari *database PubChem* dan minimalisir energi dengan perangkat lunak PyRX. Senyawa tersebut di prediksi memiliki fungsi antiobesitas dan antidiabetes. Potein pancreatic liapse (ID. 1ETH) didownload dari *database PDB* dan

3. Hasil dan Pembahasan

Pemanfaatan bahan alam dalam terapi obesitas dapat dilakukan dengan

kimia yang diduga memiliki aktivitas sebagai antiobesitas adalah senyawa triterpenoid. Triterpenoid mempunyai efek antidiabetes yang sangat berkaitan dengan antiobesitas.

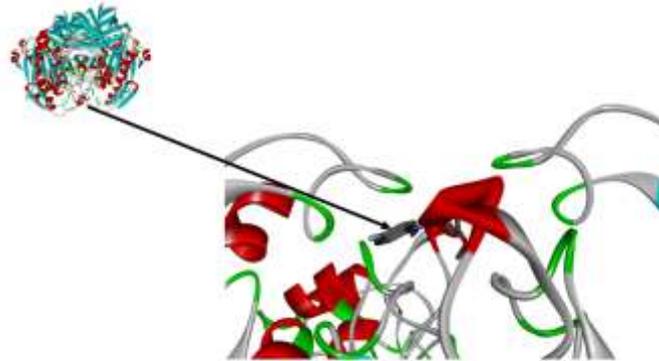
Pencegahan obesitas dapat dilakukan dengan menghambat kinerja enzim lipase pankreas. Lipase memiliki manfaat dalam pemecahan trigliserida menjadi asam lemak. Yang kemudian diabsorpsi oleh usus halus dan disimpan dalam bentuk sel adiposa [6]. Penghambat lipase ini menjadi alternatif strategi untuk pencegahan obesitas. Tujuan penelitian ini yaitu untuk mengidentifikasi fungsi senyawa triterpenoid yang terkandung dalam daun katuk sebagai penghambat lipase untuk pencegahan obesitas. Beberapa kajian membuktikan bahwa kelinci yang diberikan suplementasi daun katuk dalam makanannya mengalami penurunan kadar glukosa darah dan kolesterol total. Tujuan penelitian ini adalah menganalisis potensi senyawa triterpenoid sebagai terapi anti diabetes secara molekuler.

diinteraksikan dengan senyawa bioaktif triterpenoid menggunakan *Hex* versi 8.0.0 dan diamati dengan *Discovery studio* versi 19.0.0. parameter pengamatan berupa afinitas ikatan dalam kcal/mol, struktur 3D kompleks ikatan ligand protein, residu asam amino yang berikatan dengan ligand, struktur 2D kompleks ligand-protein, model hidrofobitas dan hydrogen [7]–[10].

memanfaatkan daun katuk (*Sauropus androgynus* L Merr. Daun katuk

mengandung Senyawa kimia yaitu alkaloid, saponin, flavonoid, tanin, dan triterpenoid [11]. Salah satu kandungan

kimia yang diduga memiliki aktivitas sebagai antiobesitas adalah senyawa triterpenoid.



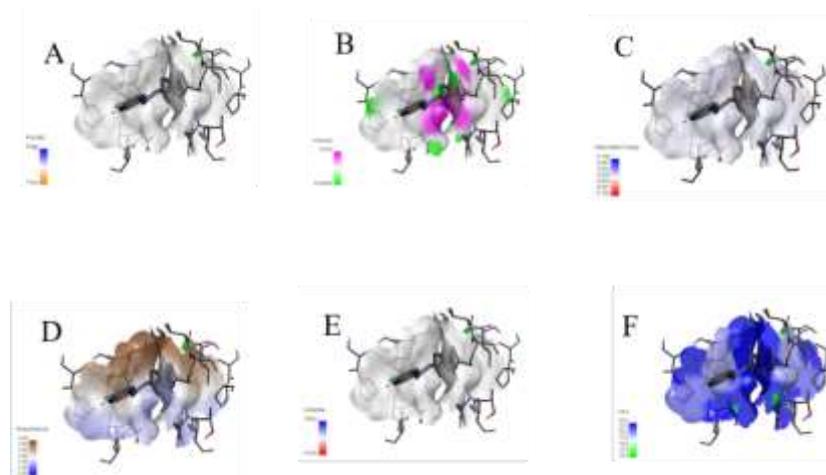
Gambar 1. Visulisasi 3D interaksi senyawa bioaktif triterpenoid dan Protein lipase pankreas.

Senyawa triterpenoid bioaktif dari *Sauropus androgynus* (L) Merr yang diinteraksikan dengan protein lipase pankreas menunjukkan ikatan yang positif dengan membentuk empat residu asam amino yang berikatan

dengan triterpenoid (Gambar 1). Triterpenoid dan protein lipase pankreas terutama berinteraksi melalui pembentukan pada residu asam amino VAL21, ALA15, PRO16, ILE20 dengan kategori ikatan *Hydrophobic* jenis ikatan *pi-Alkyl* (Tabel 1).

Tabel 1. Interaksi Antara Triterpenoid Terhadap Protein Lipase Pankreas

Name	Distance	Category	Types	From Chemistry	To Chemistry
N:UNK1 - A:VAL21	5.0766	Hydrophobic	Pi-Alkyl	Pi-Orbitals	Alkyl
N:UNK1 - A:ALA15	4.6846	Hydrophobic	Pi-Alkyl	Pi-Orbitals	Alkyl
N:UNK1 - A:PRO16	4.68969	Hydrophobic	Pi-Alkyl	Pi-Orbitals	Alkyl
N:UNK1 - A:ILE20	5.26657	Hydrophobic	Pi-Alkyl	Pi-Orbitals	Alkyl
N:UNK1 - C:ALA15	5.21116	Hydrophobic	Pi-Alkyl	Pi-Orbitals	Alkyl



Gambar 2. Interaksi senyawa triterpenoid dan protein lipase pankreas. A. Aromatic, B. H-bonds, C. Charge, D. Hydrophobicity, E. Ionizability, F. SAS.

Aromatik tidak terdapat di tepi maupun di permukaan, itu ditunjukkan pada gambar tidak terdapat daerah yang berwarna biru dan juga coklat (Gambar 2. A), pada H-bonds terdapat donor yang ditunjukkan dengan adanya warna ungu dan sedikit *acceptor* yang ditandai dengan warna hijau di beberapa daerah (Gambar 2. B), *Interpolated Charge* berada di daerah yang netral yaitu di sekitar angka 0,000 walaupun ada warna biru yang terlihat tidak begitu mencolok pada beberapa daerah, (Gambar 2. C), tingkat *Hydrophobicity* sangat tinggi itu terlihat pada gambar bahwa ada warna coklat yang sangat mencolok di sekitar angka 3,00 mendominasi sebagian besar daerah, sama halnya dengan warna biru tetapi tidak begitu mencolok di sekitar angka -1,00 (Gambar 2. D), *Ionizability* bersifat netral karena tidak terlihat warna biru yang indikasinya asam dan basa yang indikasinya warna merah, (Gambar 2. E), SAS lebih tinggi karena didominasi oleh warna biru di sekitar angka 22,5 dan sedikit warna hijau di beberapa daerah (Gambar 2. F).

Beberapa penelitian telah melaporkan ekstrak tanaman mampu aktivitas lipase salah satunya yaitu tanaman daun katuk. Protein lipase pankreas berikatan dengan senyawa triterpenoid pada tumbuhan daun katuk (*Sauropus androgynus* (L) Merr) dapat menghambat kinerja enzim lipase pankreas. Lipase memiliki manfaat dalam pemecahan triacilgliserida menjadi asam lemak, penghambatan yang dilakukan akan berdampak terhadap regulasi sel adiposa [6].

Lipase berperan dalam pemecahan triacilgliserida menjadi asam lemak, yang selanjutnya diabsorpsi oleh usus halus dan disimpan dalam bentuk sel adiposa [12]–[14]. Energi ikatan senyawa dan protein target dipengaruhi oleh jenis ikatan yang terbentuk antara kompleks senyawa dengan protein, jumlah ikatan, jenis interaksi yakni interaksi antara atom dengan residu asam amino. Banyaknya ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik. Semakin kompleks maka semakin rendah energi ikatan yang terbentuk dan semakin kuat ikatan antara senyawa dan protein [15]–[19].

4. Simpulan

Triterpenoid dari senyawa yang berasal dari daun katuk (*Sauropus androgynus* (L) Merr) berpotensi sebagai inhibitor

protein lipase pankreas secara molekuler. Uji in vitro dan in vivo perlu dilakukan uji antiobesitas secara lanjut.

Daftar Pustaka

- [1] C. N. Rachmi, M. Li, and L. Alison Baur, "Overweight and obesity in Indonesia: prevalence and risk factors—a literature review," *Public Health*, vol. 147, pp. 20–29, Jun. 2017, doi: 10.1016/j.puhe.2017.02.002.
- [2] M. D. Catarino, A. M. S. Silva, and S. M. Cardoso, "Fucaceae: A source of bioactive phlorotannins," *International Journal of Molecular Sciences*, vol. 18, no. 6, 2017, doi: 10.3390/ijms18061327.
- [3] A. Leandro *et al.*, "Seaweed Phenolics: From Extraction to Applications," *Marine Drugs*, vol. 18, no. 8, pp. 1–47, 2020.
- [4] B. Pradhan, R. Nayak, S. Patra, B. P. Jit, A. Ragusa, and M. Jena, "Bioactive Metabolites from Marine Algae as Potent Pharmacophores against Oxidative Stress-Associated

- Human Diseases: A Comprehensive Review,” *Molecules (Basel, Switzerland)*, vol. 26, no. 1, 2020, doi: 10.3390/molecules26010037.
- [5] M. Arista, “Aktivitas Antioksidan Ekstrak Etanol 80% Dan 96% Daun Katuk (*Sauropus Androgynus* (L.) Merr.),” *Calyptra : Jurnal Ilmiah Mahasiswa Universitas Surabaya*, vol. 2, no. 2, 2013.
- [6] Y. Bare, D. R. T. Sari, M. C. Mogi, and M. M. D. Nurak, “Senyawa Fucodiphlorethol Dan Phloroglucinol Alga Coklat Sebagai Inhibitor Lipase Secara In Silico,” *Florea: Jurnal Biologi dan Pembelajarannya*, vol. 9, no. 1, p. 7, 2022, doi: <http://doi.org/10.25273/florea.v9i1.11743>.
- [7] Y. Bare and D. R. T. Sari, “Pengembangan Lembar Kerja Mahasiswa (LKM) Berbasis Inkuiri Pada Materi Interaksi Molekuler,” *BioEdUIN*, vol. 11, no. 1, p. 8, 2021, doi: <https://doi.org/10.15575/bioeduin.v11i1.12077>.
- [8] T. N. Elfi, Y. N. Bunga, and Y. Bare, “Studi Aktivitas Biologi Secara In Silico Senyawa Nonivamide Dan Nordihydrocapsaicin Sebagai Anti Inflamasi,” *florea*, vol. 8, no. 2, p. 82, Nov. 2021, doi: 10.25273/florea.v8i2.9983.
- [9] A. Vincentius and Y. Bare, “Pemetaan Bioaktivitas Senyawa pada Kantong Tinta Cumi-cumi (*Loligo vulgaris*) Secara In Silico,” *Jurnal Ilmiah Wahana Pendidikan*, vol. 8, no. 2, pp. 09–16, Feb. 2022, doi: 10.5281/ZENODO.5971402.
- [10] Y. Bare, N. I. Ahmad, and Y. N. Bunga, “Molecular Interaction of Chili Compounds (*Capsicum annum* L) as a COX-2 Inhibitor,” *Jurnal Mangifera Edu*, vol. 6, no. 2, pp. 115–128, 2022, doi: <https://doi.org/10.31943/mangiferaedu.v6i2.124>.
- [11] N. M. P. Susanti, I. N. A. Budiman, and N. K. Warditiani, “SKRINING FITOKIMIA EKSTRAK ETANOL 90% DAUN KATUK (*Sauropus androgynus* (L.) Merr.),” *Jurnal Farmasi Udayana*, vol. 3, no. 1, p. 4, 2014.
- [12] J. Hermoso, D. Pignol, B. Kerfelec, I. Crenon, C. Chapus, and J. C. Fontecilla-Camps, “Lipase activation by nonionic detergents. The crystal structure of the porcine lipase-colipase-tetraethylene glycol mono-octyl ether complex,” *Journal of Biological Chemistry*, vol. 271, no. 30, pp. 18007–18016, 1996, doi: 10.1074/jbc.271.30.18007.
- [13] U. Chedda, A. Kaikini, S. Bagle, and M. Seervi, “In vitro pancreatic lipase inhibition potential of commonly used Indian spices,” *IOSR Journal Of Pharmacy*, vol. 6, no. 10, pp. 10–13, 2016.
- [14] Q. Cao *et al.*, “The mechanism of chlorogenic acid inhibits lipid oxidation: An investigation using multi-spectroscopic methods and molecular docking,” *Food Chemistry*, vol. 333, no. July, p. 127528, 2020, doi: 10.1016/j.foodchem.2020.127528.
- [15] G. C. Krisnamurti, D. R. T. Sari, and Y. Bare, “Capsaicinoids from *Capsicum annum* as an Alternative FabH Inhibitor of *Mycobacterium Tuberculosis*: In Silico Study,” *Makara Journal Of Science*, vol. 25, no. 4, p. 9, 2021, doi: 10.7454/mss.v25i4.1248.
- [16] G. C. Krisnamurti, Y. Bare, M. Amin, and C. N. Primiani, “Combination of Curcumin from *Curcuma longa* and Procyanidin from *Tamarindus indica* in Inhibiting Cyclooxygenases for Primary Dysmenorrhea Therapy: In silico study,” *Biointerface Res Appl Chem*, vol. 11, no. 1, pp. 7460–7467, Jun. 2020, doi: 10.33263/BRIAC111.74607467.
- [17] Y. Bare, D. R. T. Sari, W. O. Ujiana, P. Y. S. Ra’o, and K. Pada, “REPURPOSING OF 6-PARADOL AS AN ALTERNATIVE HERBAL MEDICINE FOR ALZHEIMER DISEASE,” *MS*, vol. 7, no. 2, pp. 1–8, Apr. 2022, doi: 10.37874/ms.v7i2.289.
- [18] Y. Bare, “Interaction Phloroglucinol as inflammation therapy through Cyclooxygenase-2 (COX-2) gene inhibition,” *JINTO*, vol. 8, no. 1, pp. 14–21, Mar. 2022, doi: 10.36733/medicamento.v8i1.3162.
- [19] M. S. Y. Bare, M. Helvina, A. P. Pili, and G. C. Krisnamurti, “Studi In silico Potensi aktivitas 10-shogaol dalam Jahe (*Zingiber officinale*) terhadap gen ACE,” *Spizaetus: Jurnal Biologi dan Pendidikan Biologi*, vol. 1, no. 3, pp. 12–18, 2020.