

Studi Metabolomik Daun Sungkai (*Peronema canescens* Jack.) dan Potensinya sebagai Immunostimulan dengan Simulasi Molekuler = Metabolomics Study of Sungkai Leaves (*Peronema canescens* Jack.) and Its Potential as an Immunostimulant with Molecular Simulations

Azmi Syafanah Nur Hasna, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920547329&lokasi=lokal>

Abstrak

Sungkai (*Peronema canescens* Jack.) merupakan salah satu tanaman yang banyak digunakan sebagai tanaman obat tradisional oleh masyarakat. Secara geografis, sungkai tersebar di kawasan Malaysia, Sumatera, Kalimantan, Banten, dan Jawa Barat. Senyawaan yang terdapat pada daun sungkai diduga dapat mengaktifkan sistem pertahanan tubuh sehingga respon imunitas tubuh terhadap penyakit menjadi lebih meningkat. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis metabolom ekstrak daun sungkai dari wilayah Lampung, Banten, dan Jawa Barat, serta memprediksi bioaktivitas senyawa ekstrak daun sungkai sebagai imunostimulan melalui simulasi molekuler. Analisis profil metabolit dengan LC-MS dan analisis multivariat dengan PLS-DA digunakan untuk mengetahui profil metabolit sampel daun sungkai dan mendapatkan gambaran adanya pengelompokan atau pemisahan sampel daun sungkai. Simulasi molekuler terdiri dari analisis jejaring farmakologi, molecular docking, dan molecular dynamics untuk mengidentifikasi interaksi senyawa aktif daun sungkai dengan protein target imunostimulan. Analisis metabolomik ekstrak daun sungkai mengidentifikasi senyawa penanda utama pada semua sampel dari wilayah Lampung, Banten, dan Jawa Barat, yaitu Peronemin A3, Peronemin B1, dan Peronemin B3. Berdasarkan analisis jejaring farmakologi dan uji molecular docking in silico, ketiga senyawa tersebut berpotensi sebagai agen imunostimulan karena berinteraksi dengan protein target dan memiliki nilai energi bebas pengikatan yang lebih kecil dibandingkan ligand alami pada reseptor IL6 dan PPARG. Analisis metabolomik juga mengidentifikasi senyawa penanda spesifik yang berperan dalam memberikan informasi untuk membedakan asal geografis sampel. Sampel dari wilayah Lampung memiliki senyawa penanda flavonoid, sampel dari wilayah Jawa Barat memiliki senyawa penanda triterpenoid, sedangkan sampel dari wilayah Banten tidak memiliki senyawa penanda. Senyawa aktif daun sungkai yang menjadi penanda untuk wilayah Lampung yaitu 5,7-Dihydroxy-4',6-dimethoxyflavone atau pectolinarigenin, sedangkan senyawa aktif daun sungkai yang menjadi penanda untuk wilayah Jawa Barat yaitu (22E,24R)-Stigmasta-4,22,25-trien-3-one. Kedua senyawa penanda tersebut memiliki potensi sebagai agen imunostimulan karena berinteraksi dengan protein target dan memiliki nilai energi bebas pengikatan yang sedikit lebih kecil dibandingkan ligand alami pada reseptor IL6 dan PPARG berdasarkan analisis jejaring farmakologi dan uji molecular docking in silico. Penelitian ini menunjukkan bahwa kajian metabolomik yang dipadupadankan dengan simulasi molekuler berhasil mengungkap potensi daun sungkai sebagai kandidat produk alami, terutama agen imunostimulan

Sungkai (*Peronema canescens* Jack.) belonging to the Lamiaceae family, is one of the widely used medicinal plants by the community. Geographically, sungkai is distributed in the regions of Malaysia, Sumatra, Kalimantan, Banten, and West Java. The compounds found in sungkai leaves are speculated to activate the body's defense system, thus potentially enhancing the immune response to diseases. This study aims to analyze the metabolome of Sungkai leaf extracts from the regions of Lampung, Banten, and West Java, and to predict the bioactivity of the compounds in the Sungkai leaf extract as immunostimulants

through molecular simulations. Metabolite profiling using LC-MS and multivariate analysis with PLS-DA were conducted to determine the metabolite profile of Sungkai leaf samples and to explore the potential grouping or segregation among the samples. Molecular simulations consists of network pharmacology analysis, molecular docking, and molecular dynamics to identify the interactions of active compounds in sungkai leaves with potential target proteins involved in immunostimulant activity. Metabolomic analysis of sungkai leaf extract identifies key marker compounds in all samples from the regions of Lampung, Banten, and West Java, namely Peronemin A3, Peronemin B3, and Peronemin B1. Based on network pharmacology analysis and in silico molecular docking tests, these three compounds have potential as immunostimulant agents due to their interaction with target proteins and lower free binding energy values compared to native ligands on IL6 and PPARG receptors. Metabolomic analysis also identified specific marker compounds that provide information to distinguish the geographical origin of the samples. Samples from the Lampung region contain flavonoid marker compounds, samples from the West Java region contain triterpenoid marker compounds, while samples from the Banten region do not have marker compounds. The active compound in sungkai leaves that serves as a marker for the Lampung region is 5,7-Dihydroxy-4',6-dimethoxyflavone or pectolinarigenin, while the active compound in sungkai leaves that serves as a marker for the West Java region is (22E,24R)-Stigmasta-4,22,25-trien-3-one. Both marker compounds have potential as immunostimulant agents because they interact with target proteins and have slightly lower free binding energy values compared to native ligands on IL6 and PPARG receptors based on network pharmacology analysis and in silico molecular docking tests. This study demonstrates that the combination of metabolomic profiling with molecular simulations successfully reveals the potential of sungkai leaves as candidates for natural products, especially immunostimulant agents.