

## PROFIL TERPENOID EKSTRAK KALUS *Gyrinops versteegii* (Gilg.) Domke DENGAN ELISITASI ASAM SALISILAT DAN PREDIKSI POTENSINYA SEBAGAI ANTIDIABETES

Amelina Damayanti

19/441247/BI/10239

Dosen Pembimbing Skripsi: Lisna Hidayati, S.Si., M.Biotech.

### INTISARI

*Gyrinops versteegii* merupakan tanaman penghasil gaharu. Daunnya banyak dimanfaatkan oleh masyarakat sebagai teh herbal kesehatan, karena mengandung terpenoid. Terpenoid diketahui memiliki aktivitas antidiabetes melalui inhibisi kerja enzim  $\alpha$ -glukosidase. Namun, terpenoid pada tanaman diproduksi dengan jumlah yang sedikit dan kandungannya dipengaruhi oleh faktor lingkungan. Disamping itu, elisitor seperti asam salisilat dapat meningkatkan kandungan terpenoid secara terkontrol. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk mengetahui profil dan potensi terpenoid dari kalus *G. versteegii* yang dielisitasi dengan asam salisilat sebagai antidiabetes melalui inhibisi  $\alpha$ -glukosidase secara *in silico*. Penelitian ini diawali dengan induksi kalus melalui perendaman eksplan dalam asam askorbat 25 mg/L dan 100 mg/L yang dikombinasikan dengan *short subculture* selama 1, 2, dan 3 menit. Kalus selanjutnya dielisitasi dengan 25  $\mu$ M asam salisilat selama 10 minggu. Kalus diekstraksi menggunakan sonikasi dan dilanjutkan dengan *profiling* terpenoid menggunakan GC-MS. Terpenoid diprediksi aktivitasnya terhadap inhibisi  $\alpha$ -glukosidase dengan PASS Online dan studi literatur, prediksi *drug-likeness* dan profil farmakokinetik dengan ADMETlab 2.0, prediksi toksisitas dengan ProToxII, dan penambatan molekuler terhadap kelompok enzim  $\alpha$ -glukosidase. Induksi kalus tercepat diperoleh pada perlakuan perendaman eksplan dalam 100 mg/L asam askorbat dan *short subculture* 1 menit, yakni 22 hari. Berdasarkan hasil GC-MS diperoleh delapan terpenoid, dua senyawa dari ekstrak kalus kontrol yaitu  $\alpha$ -santalol dan  $\beta$ -santalol; lima senyawa dari ekstrak kalus yang dielisitasi 25  $\mu$ M asam salisilat yaitu *caryophyllene oxide*,  $\beta$ -*caryophyllene*,  $\alpha$ -santalol, *patchoulol*, dan *humulene*; serta dua terpenoid dari ekstrak daun yaitu *squalene* dan *neophytadiene*. Dari prediksi fisikokimia dan farmakokinetik, lima dari delapan terpenoid meliputi  $\alpha$ -santalol, *patchoulol*, *humulene*, *caryophyllene oxide*, dan *squalene* memenuhi persyaratan bahan baku obat. Sehingga, kelima senyawa ini dapat dilakukan penambatan molekuler. *Patchoulol* menunjukkan inhibisi terbaik terhadap protein maltase-glukoamilase dengan *binding affinity* sebesar -7,4 kcal/mol dibandingkan dengan miglitol sebagai kontrol (-5,5 kcal/mol). Dengan demikian, *patchoulol* berpotensi memiliki aktivitas antidiabetes dibandingkan dengan *caryophyllene oxide*, *squalene*,  $\alpha$ -santalol, dan *humulene* secara *in silico*.

Kata kunci: *Gyrinops versteegii*, antidiabetes, asam salisilat, *in silico*, terpenoid

**TERPENOID PROFILE  
OF *Gyrinops versteegii* (Gilg.) Domke CALLUS EXTRACT  
ELICITED WITH SALICYLIC ACID  
AND PREDICTION OF ITS POTENTIAL AS AN ANTIDIABETIC**

**Amelina Damayanti  
19/441247/BI/10239**

**Supervisor: Lisna Hidayati, S.Si., M.Biotech.**

**ABSTRACT**

*Gyrinops versteegii* (Gilg.) Domke is an agarwood-producing plant. Its leaves are extensively utilized by communities as a herbal tea for health benefits due to their terpenoid content. Terpenoids are known for their antidiabetic activity through the inhibition of the  $\alpha$ -glucosidase enzyme. However, terpenoid production in plants is limited in quantity and subject to environmental factors. Furthermore, elicitors such as salicylic acid can enhance the terpenoid content in a controlled manner. Therefore, this research aims to study the terpenoid profile and potential of *G. versteegii* callus elicited with salicylic acid as an antidiabetic agent through in silico  $\alpha$ -glucosidase inhibition analysis. The research commences with callus induction via explant immersion in ascorbic acid at concentrations of 25 mg/L and 100 mg/L, combined with short subculture durations of 1, 2, and 3 minutes. Subsequently, the callus is elicited with 25  $\mu$ M salicylic acid for 10 weeks. Callus extracts are obtained using sonication, followed by terpenoid profiling through GC-MS analysis. The terpenoids identified via GC-MS are subjected to in silico analysis to predict their  $\alpha$ -glucosidase inhibition activity using PASS Online, literature review, drug-likeness and pharmacokinetic profiles using ADMETlab 2.0, toxicity predictions through ProToxII, and molecular docking against  $\alpha$ -glucosidase enzyme groups. The fastest callus induction is achieved with explant immersion in 100 mg/L ascorbic acid and a 1 minute short subculture, taking 22 days. GC-MS analysis reveals eight terpenoids, including two compounds from control callus extracts,  $\alpha$ -santalol and  $\beta$ -santalol; five compounds from callus extracts elicited with 25  $\mu$ M salicylic acid, namely caryophyllene oxide,  $\beta$ -caryophyllene,  $\alpha$ -santalol, patchoulol, and humulene; and two terpenoids from leaf extracts, squalene and neophytadiene. Based on physicochemical and pharmacokinetic predictions, five out of eight terpenoids, namely  $\alpha$ -santalol, patchoulol, humulene, caryophyllene oxide, and squalene, meet the requirements for drug raw materials. Consequently, molecular docking is performed on these five compounds. Patchoulol exhibits the highest inhibition of maltase-glucoamylase protein with a *binding affinity* of -7.4 kcal/mol compared to miglitol as a control (-5.5 kcal/mol). Thus, in silico analysis suggests that patchoulol has the potential for antidiabetic activity compared to caryophyllene oxide, squalene,  $\alpha$ -santalol, and humulene.

**Keywords:** *Gyrinops versteegii*, antidiabetic, in silico, salicylic acid, terpenoids