

Analisis dinamika molekuler senyawa kompleks 12- Lipoksigenase dengan kurkumin dan dua turunannya = Molecular dynamic analysis of complex compounds 12-Lipoxygenase with curcumin and two derivatives

Anggita Putri Edwita, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20308156&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Kurkumin adalah senyawa aktif biologis yang terdapat dalam tumbuhan *Curcuma longa* L. yang tersebar luas di daerah tropis seperti Indonesia. Kurkumin telah lama digunakan sebagai tanaman obat keluarga dan diketahui memiliki aktivitas antiinflamasi, antioksidan, dan antikanker. Salah satu mekanisme kerja kurkumin sebagai antikanker adalah dengan menghambat aktivitas enzim 12-lipoksigenase. Mekanisme tersebut diketahui dari penelitian dengan melakukan penambatan molekuler kurkumin dengan enzim 12-lipoksigenase. Akan tetapi, hasil penambatan molekuler memiliki kelemahan karena dilakukan dalam keadaan senyawa dengan struktur yang kaku (rigid). Pada kenyataannya, makromolekul dan ligan yang ditambatkan memiliki torsi sehingga bergerak dengan dinamis dari waktu ke waktu. Analisis dinamika molekuler senyawa kompleks enzim 12- lipoksigenase dengan kurkumin dan dua turunan alaminya, demetoksikurkumin dan bisdemetoksikurkumin, dilakukan menggunakan hasil penambatan molekulernya, dan dianalisis dengan mengevaluasi nilai RMSF, energi potensial, dan kondisi ikatan hidrogen. Berdasarkan ketiga parameter tersebut, interaksi enzim 12-lipoksigenase dengan kurkumin, demetoksikurkumin, dan bisdemetoksikurkumin menunjukkan kestabilan selama waktu simulasi 2000 pikodetik (2 nanodetik).

<hr>

ABSTRACT

Curcumin is the biologically active compound contained in the plant *Curcuma longa* L. which is widespread in tropical areas like Indonesia. Curcumin has long been used as plant medicine and is known to have anti-inflammatory activity, antioxidant, and anticancer. One of the mechanism of action as an anticancer activity is to inhibit the activity of 12-lipoxygenase. The mechanism is studied as the result from the molecular docking of curcumin with 12-lipoxygenase. However, the molecular dockings result have a weakness because it is done in a state of compounds with a rigid structure. In fact, macromolecules and the tethered ligand has the torque to move dynamically over time. Molecular dynamics analysis of complex compounds 12-lipoxygenase with curcumin and its two natural derivatives, demethoxycurcumin, and bisdemethoxycurcumin performed using the results of molecular docking and analyzed by evaluating the value of RMSF, the potential energy, and hydrogen bonding conditions. Based on these three parameters, the interaction of 12-lipoksigenase with curcumin, demethoxycurcumin, and bisdemethoxycurcumin showed stability during the 2000 (2 nanosecond) simulation time.