

Penambatan molekuler beberapa senyawa kurkuminoid pada Siklooksigenase (Poster Presentation) - Kongres Nasional XVIII Ikatan Sarjana Farmasi Indonesia (ISFI) 7-9 Desember 2009

Arry Yanuar, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20461548&lokasi=lokal>

Abstrak

Siklooksigenase merupakan enzim yang mengkonversi asam arakidonat menjadi prostaglandin. Prostaglandin yang dihasilkan berperan penting dalam menimbulkan respons inflamasi. Oleh karena itu, obat-obat antiinflamasi baru umumnya dikembangkan berdasarkan aktivitas inhibisi siklooksigenase.

Kurkumin, senyawa aktif dari *Curcuma longa*, dan analog alamiahnya memiliki aktivitas inhibisi siklooksigenase yang teramati secara *in vitro* dan *in vivo* pada penelitian sebelumnya. Pada penelitian ini, dilakukan pengujian secara *in silico* melalui penambatan molekuler menggunakan AutoDock 4.0 untuk mengamati aktivitas inhibisi siklooksigenase beberapa analog kurkuminoid sintesis.

Dari hasil penambatan molekuler kemudian analog diperingkatkan berdasarkan energi ikatan dan konstanta inhibisinya. K_i . Analog yang diuji memiliki rata-rata energi kluster terendah -10,287 kkal/mol dan tertinggi -9,220 kkal/mol. Sedangkan K_i terendah adalah 22,997 nM dan tertinggi adalah 130,744 nM. Daerah pengikatan substrat yang penting adalah Ser 353, Tyr 355, Tyr 385, dan Trp 387.