

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: <http://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 vitro 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 ikatan 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.