

Screening Aktivitas Anti Inflamasi Senyawa Aktif yang Terkandung pada Beberapa Tanaman Obat Indonesia Melalui Penghambatan Enzim 12-Lipoksigenase secara In Silico

Chatarina Aprillia Priyas Utami, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20181300&lokasi=lokal>

Abstrak

Asam arakidonat mengalami metabolisme menjadi dua alur dalam tubuh, yakni oleh siklooksigenase dan lipoksigenase. Pada jalur lipoksigenase, melalui enzim 12-lipoksigenase akan membebaskan leukotrien dan berbagai substansi seperti 12-HPETE, 12-HETE dan sebagainya yang berperan penting sebagai mediator inflamasi. Berbagai macam jenis tanaman obat tentunya memiliki kandungan berkhasiat untuk menghambat mekanisme inflamasi dari enzim 12-lipoksigenase. Kurkumin, baicalin, epigallocatekin merupakan sebagian dari banyak senyawa yang dapat menghambat kerja enzim tersebut. Dengan metode penambatan molekuler secara in silico, penelitian ini diharapkan mampu melakukan screening terhadap aktivitas senyawa aktif yang terkandung dalam tanaman obat Indonesia. Melalui program komputasi AutoDock4, dapat diketahui aktivitas antara ligan yang merupakan senyawa aktif tanaman obat dengan 12-lipoksigenase sebagai protein targetnya. Hasil penambatan molekuler senyawa aktif tanaman obat menunjukkan bahwa His 360, His 365, dan His 540 berperan penting dalam daerah pengikatan substrat pada enzim 12-LOX, dan adanya ikatan hidrogen yang bertanggungjawab pada aktivitas penghambatan enzim tersebut.

<hr>

Arachidonic acid is metabolized by 12-LOX to 12(S)-hydroxyeicosatetraenoic acid [12(S)-HETE], and this biologically active metabolite is involved in inflammation. Different types of medicinal plant certainly contain some of the active substances to prevent mechanism of inflammation by enzyme 12-lipoxygenase (12-LOX). Curcumin, baicalein, epigallocatechin are some part of many compounds that can inhibit the enzyme work. With the docking methods through in silico, this research is expected to make a screening of the active compound activity in the medicinal plants of Indonesia. AutoDock4 program with the docking simulation tools, can be utilized to study interaction between ligand from various active compound in medicinal plant with a 12-lipoxygenase as a protein target. The result of molecular docking of the active compound in medicinal plant shows that His 360, His 365, and His 540 plays an important role for substrates binding in 12-LOX enzyme, and also there are hydrogen bonds that responsible for the inhibition in 12-LOX.