

Analisis in silico aktivitas antioksidan beberapa derivat sakarin dalam regulasi Keap1-Nrf2 dan iNOS = In silico analysis of several saccharine derivatives in antioxidant activity as Keap1-Nrf2 and iNOS regulator

Bimmo Ciptono Kuncoro, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20458438&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Konsentrasi rendah oksigen reaktif dan nitrogen reaktif berfungsi dalam mediasi pemberian sinyal regulator Kelch-like ECH-associated Protein-1 Keap1 . Konsentrasi tinggi oksigen reaktif dan nitrogen reaktif akan mengakibatkan kadar nitrat oksida tinggi dan menyebabkan berbagai macam penyakit. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh parameter optimum penambatan molekuler dan mengetahui afinitas serta interaksi senyawa derivat sakarin terhadap target terkait antioksidan, yaitu Kelch-like ECH-associated 1-Nuclear factor erythroid 2-related factor 2 Keap1-Nrf2 dan enzim inducible nitric oxide synthase iNOS . Saat ini, penelitian mengenai senyawa antioksidan sudah berkembang dan salah satu senyawa yang berpotensi sebagai antioksidan adalah senyawa derivat sakarin. Beberapa senyawa derivat sakarin telah diuji secara in vitro dan memiliki aktivitas antioksidan. Metode pendekatan pada penelitian ini adalah secara in silico. Pada penelitian ini, dilakukan penambatan sembilan senyawa derivat sakarin terhadap kompleks Keap1 dan enzim inducible nitric oxide synthase iNOS menggunakan parameter AutoDock, AutoDock4Zn, dan Vina. Berdasarkan hasil penambatan, metode terbaik terhadap kompleks Keap1 dengan menggunakan Vina dan terhadap enzim inducible nitric oxide synthase iNOS dengan menggunakan AutoDock4Zn. Senyawa yang memiliki afinitas ikatan dan interaksi terhadap kompleks Keap1 dan enzim inducible nitric oxide synthase iNOS terbaik adalah senyawa 9 dan senyawa 5.<

<hr>

ABSTRACT

Low concentrations of reactive oxygen and reactive nitrogen have a function to mediate signaling of regulator Kelch like ECH associated protein 1 Keap1 . High concentrations of reactive oxygen and reactive nitrogen resulted in high levels of nitric oxide which could cause various diseases. This research aimed to obtain molecular docking optimum parameter, determine binding affinity and saccharine derivative compound interaction to antioxidant target, Kelch like ECH associated 1 Nuclear factor erythroid 2 related factor 2 Keap1 Nrf2 and inducible nitric oxide synthase iNOS enzyme. Current research on antioxidant compounds has developed and one of the potential antioxidant compounds is saccharine derivative. Some saccharine derivative compounds have been tested by in vitro method and it shown antioxidant activity. The approaching method in this research is done by in silico method. In this study, nine saccharine derivative compounds were docked to Keap1 complex and inducible nitric oxide synthase iNOS enzyme by AutoDock, AutoDock4Zn, and Vina parameters. Based on the docking results, the best method for Keap1 complex by using Vina and on the inducible nitric oxide synthase iNOS enzyme by using AutoDock4Zn. The compounds which have the best binding affinity and the best interaction against Keap1 complex and inducible nitric oxide synthase iNOS enzyme are compound 9 and compound 5.