

INTISARI

KARIM MA., 2018, ANALISIS DOCKING MOLEKULER SENYAWA FLAVONOID DAN STEROID TERHADAP ENZIM SIKLOOKSIGENASE DAN FOSFOLIPASE, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Enzim yang mempengaruhi proses inflamasi adalah fosfolipase A₂ (PLA₂) dan siklooksigenase (COX). Dalam penelitian ini, flavonoid dan steroid digunakan sebagai ligan dan enzim PLA₂, COX-1 serta COX-2 sebagai target molekuler untuk mengetahui interaksi obat dengan reseptor dan prediksi ADMET senyawa kandidat.

Penelitian ini memprediksi interaksi antara steroid dengan PLA₂ flavonoid, dan curcuminoid dengan COX, kemudian disimulasi menggunakan perangkat lunak PyRx 0.8, lalu divisualisasikan menggunakan *Discovery Studio Visualizer* dan PyMol, serta diprediksi ADMET menggunakan SwissADME

Hasil menunjukkan bahwa Cucurbitacin R dan dehidrocucurbitacin B berinteraksi dengan respon yang serupa dengan dexametason terhadap PLA₂, sedangkan Flavonoid apigenin dan luteolin berinteraksi dengan respon yang serupa dengan meloxicam terhadap COX-1 dan diosmetin paling mirip dengan celecoxib pada COX-2 dan prediksi ADME menunjukkan senyawa flavonoid memenuhi syarat aturan Lipinski, tidak dapat berdifusi pada sawar otak, bukan substrat protein gp, dan kebanyakan dimetabolisme oleh CYP450, sedangkan steroid cucurbitacin belum memenuhi syarat aturan Lipinski, tidak dapat berdifusi pada sawar otak, bukan merupakan substrat protein gp, dan umumnya termasuk inhibitor CYP3A4.

Kata kunci : PLA, COX, Steroid, Flavonoid. Antiinflamasi, *docking*, ADME

ABSTRACT

KARIM MA., 2018, MOLECULAR DOCKING ANALYSIS FLAVONOID AND STEROID COMPOUND TO CYCLOOXYGENASE AND PHOSPHOLIPASE ENZYMES, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

There are two enzymes affects in the inflammatory process, which are phospholipase A₂ (PLA₂) and cyclooxygenase (COX). In this study, flavonoids and steroids were used as ligands and PLA₂, COX-1 and COX-2 enzymes as molecular targets to determine drug interactions with receptors and predicted ADMET.

This study predicted the interaction between steroids with PLA₂ flavonoids, and curcuminoid with COX. Dexametason as ligand for PLA₂, meloxicam as ligand for COX-1 and celecoxib as ligands for COX-2 used as standard. and then docking using PyRx 0.8 software, then visualized using Discovery Studio Visualizer and PyMol, and ADMET predicted using SwissADME

The results showed that Cucurbitacin R and dehydrocucurbitacin B interacted with a response similar to dexamethasone to PLA₂, whereas Flavonoid apigenin and luteolin interacted with a response similar to meloxicam to COX-1 and diosmetin most closely resembled celecoxib in COX-2 and ADME prediction showed flavonoid compounds eligible for the Lipinski rule, can not diffuse on the brain barrier, not the gp protein substrate, and most metabolized by CYP450, whereas cucurbitacin steroids do not meet the Lipinski rule requirements, can not diffuse in the brain barrier, are not gp protein substrate, and generally include CYP3A4 inhibitors

Keywords : PLA, COX, Steroid, Flavonoid. Antiinflammas, docking, ADME