

PENAPISAN VIRTUAL SENYAWA DALAM TANAMAN FAMILIA *APOCYNACEAE* SEBAGAI LIGAN PADA RESEPTOR SIKLOOKSIGENASE-2

Esti Mulatsari^{1)*}, Esti Mumpuni²⁾, Agus Purwangana³⁾, Aljukhri Rahmadani⁴⁾

¹ Fakultas Farmasi, Universitas Pancasila

Email: estimulatsari@gmail.com

² Fakultas Farmasi, Universitas Pancasila

Email: esti_mumpuni@yahoo.com

³ Fakultas Farmasi, Universitas Pancasila

Email: agusp_12@gmail.com

⁴ Fakultas Farmasi, Universitas Pancasila

*corresponding author

Abstrak

Secara empiris, tanaman dalam family *apocynaceae* digunakan untuk mengobati inflamasi. Hal tersebut didukung beberapa penelitian yang menyatakan bahwa sebagian tanaman dari familia *apocynaceae* memiliki aktivitas sebagai antiinflamasi dan antikanker. Pada penelitian ini dilakukan penapisan virtual dan elusidasi moda ikatan terhadap 123 senyawa dari familia *Apocyanaceae* dengan menggunakan protokol SBVS EE_COX2_V.1.0 dengan reseptor *siklooksigenase-2*. Tujuan penelitian adalah untuk mengetahui senyawa-senyawa yang memiliki aktivitas inhibitor *siklooksigenase-2* secara *in silico* dan memvisualisasikan interaksi ligand dengan asam amino pada *binding site* reseptor.. Uji *in silico* dilakukan dengan metode *molecular docking* dengan PLANTS untuk mendapatkan nilai *score docking (ChemPLP)*. Berdasarkan skor *ChemPLP* dari simulasi *docking*, diperoleh 25 senyawa yang aktif menghambat *siklooksigenase-2*, yaitu 12 senyawa dari tanaman *Allamanda cathartica*; 2 senyawa dari tanaman *Alstonia scholaris*; 1 senyawa dari tanaman *Alyxia reinwardtii*; 4 senyawa dari tanaman *Catharanthus roseus*; 3 senyawa dari tanaman *Cerbera manghas*; 1 senyawa dari tanaman *Rauvolfia serpentine*; 2 senyawa dari tanaman *Strophantus gratus*.

Kata kunci: *apocynaceae*, *siklooksigenase-2*, *docking*

Abstract

Empirically, the *Apocynaceae* family is used to treat inflammation. This was confirmed by several studies which state that some plants of the *Apocynaceae* family have anti-inflammatory and anticancer activities. In this study, virtual screening and bond mode elucidation on 123 compounds of the *Apocyanaceae* family using the SBVS EE_COX2_V.1.0 protocol with *cyclooxygenase-2* receptor. The aim of this study was to determine the compounds that have *cyclooxygenase-2* inhibitory activity using *in silico* test and was to visualized ligand interactions with amino acids at the receptor binding site. The *In silico* test was carried out by molecular docking method with PLANTS to get the docking score (*ChemPLP*). Based on the *ChemPLP* score obtained 25 compounds which active in inhibited *cyclooxygenase-2*, namely 12 compounds of *Allamanda cathartica*; 2 compounds of *Alstonia scholaris*; 1 compound of *Alyxia reinwardtii*; 4 compounds of *Catharanthus roseus*; 3 compounds of *Cerbera manghas*; 1 compound of *Rauvolfia serpentine*; 2 compounds of *Strophantus gratus*.

Keywords: *apocynaceae*, *cyclooxygenase-2*, *docking*