

ABSTRAK

Penambatan Molekul Senyawa Karagenan dari Macro Alga (*Eucheuma cottonii*) terhadap Enzim COX-2 Sebagai Antiinflamasi

Oleh:

**Mochamad Irfan Maulana
191FF03067**

Antiinflamasi memiliki definisi sebagai obat ataupun golongan obat yang memiliki aktivitas menekan ataupun mengurangi peradangan. Inflamasi atau radang bisa disebabkan oleh berbagai rangsangan yang mencakup luka-luka fisik, panas, interaksi antigen-antibodi, dan infeksi. Makro alga yang akan diteliti dengan kemungkinan memiliki khasiat sebagai obat antiinflamasi yaitu rumput laut *Eucheuma cottonii* kandungan yang akan diteliti yaitu karagenan karena alga *Eucheuma cottonii* merupakan bagian dari carrageenophytes, yaitu alga produsen karagenan yang merupakan senyawa polisakarida. Pengembangan obat baru, penggunaan dari komputer dalam beberapa waktu terakhir menjadi sesuatu yang menarik sebagai alat untuk menemukan obat baru. Beberapa metode komputasi telah digunakan untuk merancang dan mengembangkan seperti salah satunya yaitu molecular docking atau penambatan molekul. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan informasi senyawa dari karagenan yang berasal dari tanaman rumput laut *Eucheuma cottonii* yang dapat menghambat kerja enzim *cyclooxygenase II*. Metode penelitian meliputi preparasi ligan uji, preparasi protein target dengan kode 2WA1, validasi docking, dan *docking molecular* pada ligan uji terhadap protein target. Berdasarkan dari hasil penelitian penambatan molekul dari 24 ligan uji terdapat 2 ligan uji yang memiliki nilai aktivitas terbaik sebagai penghambat kerja enzim *cyclooxygenase II* yaitu ligan uji S10(N-(1,3-Benzothiazol-2-yl)-2-[(5-methyl1,3,4-thiadiazol-2-yl) sulfanyl] acetamide) dan S10 (N-(2-Cyanophenyl)-2-[[3-(methylsulfanyl)-1,2,4-thiadiazol-5-yl] sulfanyl]acetamide), dengan nilai ΔG , K_i berturut turut adalah -7.29 dan -7.11 kcal/mol dan 4.56 dan 6.19 μM .

Kata Kunci: Antiinflamasi, *cyclooxygenase II*, *Eucheuma cottonii*, *Molecular Docking*

ABSTRACT

Molecular attachment of carrageenan compounds from macro algae (Eucheuma cottonii) to the COX-2 enzyme as an anti-inflammatory

By:

Mochamad Irfan Maulana

191FF03067

Anti-inflammatory is defined as a drug or class of drugs that has activity to suppress or reduce inflammation. Inflammation or inflammation can be caused by a variety of stimuli including physical injury, heat, antigen-antibody interactions, and infection. The macroalgae that will be studied with the possibility of having efficacy as an anti-inflammatory drug is the seaweed *Eucheuma cottonii*. The content that will be studied is carrageenan because *Eucheuma cottonii* algae is part of the carrageenophytes, namely algae that produce carrageenan which is a polysaccharide compound. The development of new drugs, the use of computers in recent times has become an interesting tool for finding new drugs. Several computational methods have been used to design and develop, one of which is molecular docking. This study aims to obtain information on compounds from carrageenan derived from the seaweed plant *Eucheuma cottonii* which can inhibit the action of the cyclooxygenase II enzyme. Research methods included preparation of the test ligand, preparation of the target protein with code 2WA1, validation of docking, and molecular docking of the test ligand against the target protein. Based on the results of the molecular docking study of the 24 test ligands, there were 2 test ligands that had the best activity values as inhibitors of the cyclooxygenase II enzyme, namely the test ligand S10(N-(1,3-Benzothiazol-2-yl)-2-[(5-methyl-1,3,4-thiadiazol-2-yl) sulfanyl] acetamide) and S10 (N-(2-Cyanophenyl)-2-{[3-(methylsulfanyl)-1,2,4-thiadiazol-5-yl] sulfanyl }acetamide), with ΔG values, K_i are -7.29 and -7.11 kcal/mol and 4.56 and 6.19 μM , respectively.

Keywords: Anti-inflammatory, cyclooxygenase II enzyme, *Eucheuma cottonii*, Molecular Docking