

DOCKING MOLEKULAR FENOLIK DAUN KEMANGI (*Ocimum basilicum* L.) SEBAGAI POTENSI ANTI INFLAMASI DENGAN AUTODOCK-VINA

Diyan Sakti Purwanto¹⁾, Iin Suhesti²⁾

¹Laboratorium Biologi Farmasi, Politeknik Indonusa Surakarta

²Laboratorium Teknologi Farmasi, Politeknik Indonusa Surakarta

¹Jl. K.H Samanhudi No.31, Bumi, Kec. Laweyan, Kota Surakarta, Jawa Tengah

²Jl. Palem No. 8, Jati, Cemani, Sukoharjo, Jawa Tengah

Email: ¹diyansakti@poltekindonusa.ac.id, ²iinsuhesti@poltekindonusa.ac.id

Abstrak

Daun kemangi (*Ocimum basilicum* L.) memiliki kandungan senyawa fenolik dan senyawa alami yang meliputi polifenol seperti flavonoid dan antosianin yang memiliki berbagai manfaat diantaranya sebagai antioksidan, antimikroba, antifungi, antitoksik, antiinflamasi dan antihiperlipidemia. Inflamasi merupakan suatu respon terhadap cedera jaringan yang melibatkan proses fisiologis aktivasi enzim *cyclooxygenase* (COX) yang memiliki dua isoform yaitu enzim *cyclooxygenase-1* (COX-1) dan *cyclooxygenase-2* (COX-2). Penggunaan obat antiinflamasi golongan Anti Inflamasi Non Steroid (AINS) dan golongan steroid mempunyai efek samping dalam penggunaan jangka panjang. Dari studi in vitro fenolik menunjukkan aktivitas anti-inflamasi yang signifikan dengan menghalangi sintesis dan pelepasan histamin dan mediator-mediator alergi inflamator lainnya. Fenolik memiliki aktivitas antioksidan dan aksi cadangan vitamin C serta dipercaya dapat melindungi tubuh dari beberapa jenis penyakit degenerative dengan cara mencegah terjadinya proses peroksidasi lemak. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui peran Fenolik yang terdapat pada daun kemangi (*Ocimum basilicum* L.) sebagai anti inflamasi ligan 6COX *cyclooxygenase-2* (COX-2) dengan menggunakan aplikasi komputasi autodock vina.

Kata kunci: Fenolik, anti inflamasi, daun kemangi (*Ocimum basilicum* L.)

PENDAHULUAN

Daun kemangi (*Ocimum basilicum* L.) memiliki kandungan senyawa fenolik dan senyawa alami yang meliputi polifenol seperti flavonoid dan antosianin yang memiliki berbagai manfaat diantaranya sebagai antioksidan, antimikroba, antifungi, antitoksik, antiinflamasi dan antihiperlipidemia (Aldian H. Luntungan & Suptijah, 2017).

Inflamasi merupakan suatu respon terhadap cedera jaringan yang melibatkan proses fisiologis aktivasi enzim *cyclooxygenase* (COX) yang memiliki dua isoform yaitu enzim *cyclooxygenase-1* (COX-1) dan *cyclooxygenase-2* (COX-2). Penggunaan obat antiinflamasi golongan Anti Inflamasi Non Steroid (AINS) dan golongan steroid mempunyai efek samping dalam penggunaan jangka panjang (Rizki, *et. al.*, 2018).

Docking molekular merupakan komputasi untuk memprediksi suatu hubungan apakah senyawa tersebut mempunyai aktifitas sebelum diujikan (Ragnhild, *et.al.*, 2014) Percobaan dengan docking molekuler ini untuk

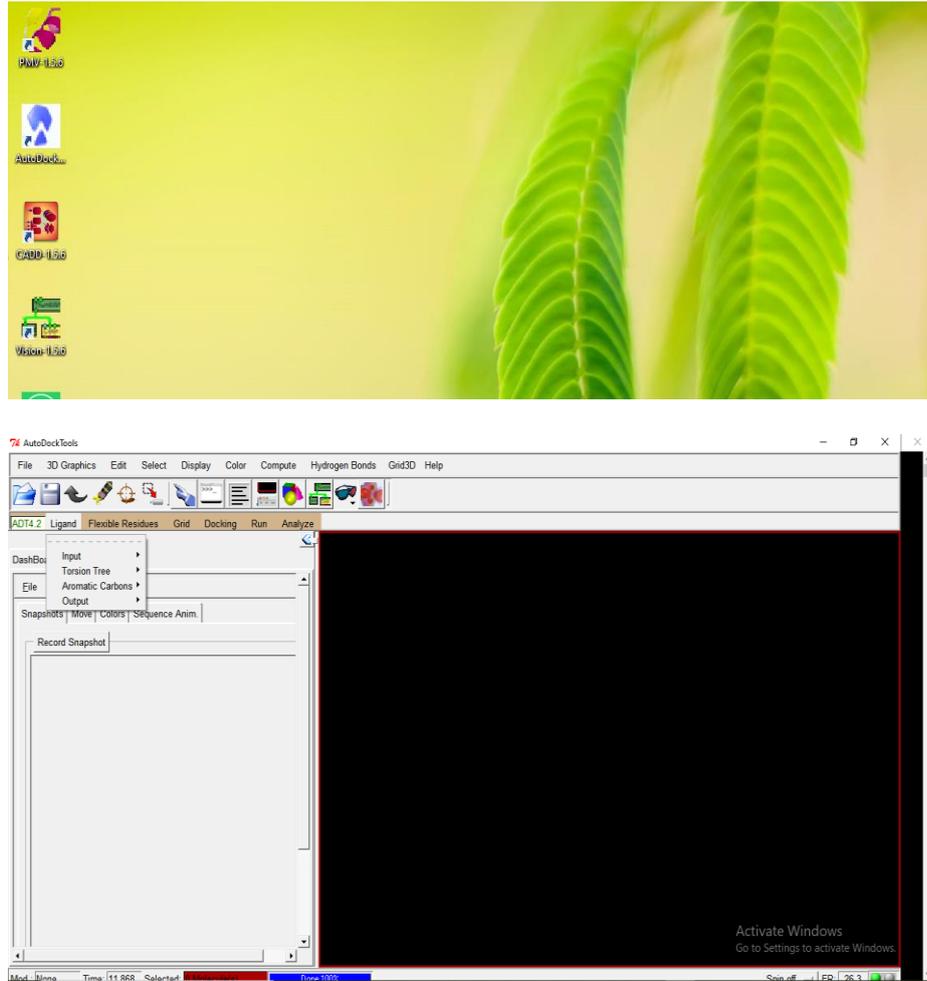
melihat obat inflamasi yang beredar mempunyai aktifitas dalam menghambat *cyclooxygenase-2*. Molecular docking dapat dilakukan dengan banyak software yang dapat di download dengan gratis. Penelitian yang dilakukan menggunakan software PyRx untuk docking dan menggunakan program Vina dan Autodock (LGA, GA dan SA) (Saputri, *et.al.*, 2016)

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui peran fenolik pada daun kemangi (*Ocimum basilicum* L.) sebagai anti inflamasi ligan 6COX *cyclooxygenase-2* (COX-2) dengan menggunakan aplikasi autodock vina.

METODE PENELITIAN

1. Alat dan Bahan

Perangkat keras yang digunakan yaitu notebook ASUS dengan spesifikasi Windows 10. Perangkat lunak yang digunakan adalah aplikasi AutoDock Vina, dan PyMOL (Gambar 1).

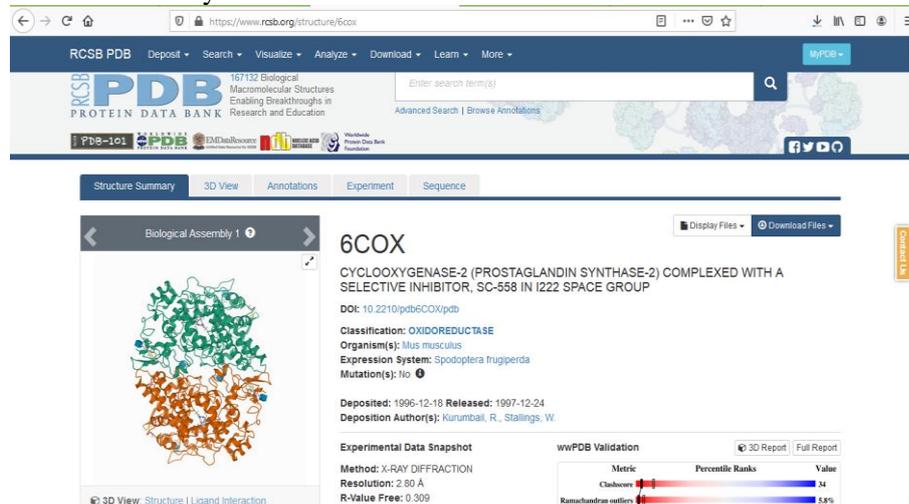


Gambar 1. Aplikasi yang di gunakan

2. Subjek Penelitian

Target yang digunakan adalah fenolik daun kemangi (*Ocimum basilicum* L.) yang dapat diunduh dari www.pdb.org dengan X-Ray diffraction yang berada pada resolusi pengukuran adalah 1,59Å. Ligan yang digunakan adalah fenolik senyawa antiinflamasi

yang telah dipersiapkan dan dilakukan preparasi dengan reseptor 6COX *cyclooxygenase-2* (prostaglandin synthase-2) *complexed with a selective inhibitor, sc-558 in 1222 space group* (Gambar 2).



Gambar 2. www.pdb.org untuk mencari struktur

3. Prosedur

a. Preparasi Protein dan Ligan

Perangkat lunak Chimera digunakan untuk memisahkan ligan natif dari protein sehingga memperoleh berkas ligan natif, protein tanpa ligan dengan mengabaikan keberadaan air dalam ekstensi pdb. Ligan senyawa antiinflamasi dapat dihasilkan dengan memanfaatkan MarvinBean Suite. Protein dan ligan dipersiapkan untuk menjadi berkas siap pakai dengan menggunakan AutoDock dan openbabel di dalam PyRx.

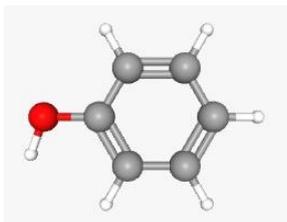
b. Validasi Metode Docking

Docking terhadap ligan natif dilakukan untuk mencari konformasi 3D ligan natif terhadap reseptor dengan memperhatikan koordinat pusat masa struktur dan besaran gridbox dari binding site pocket dalam satuan angstrom (Vina) atau *number of points* (AutoDock). Konformasi hasil docking yang diperoleh disejajarkan dengan konformasi ligan natif hasil pengukuran Gkristalografi yang dinyatakan dalam nilai *root mean square deviation* (RMSD).

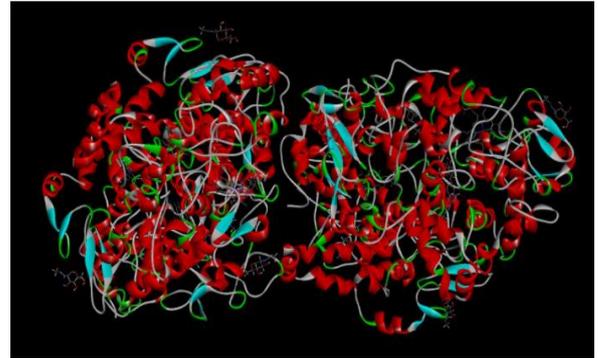
Docking Molekular dan Analisis Data Docking ligan uji dilakukan untuk menghasilkan nilai banding energi dalam satuan kkal/mol. Nilai binding energy yang digunakan adalah yang memperoleh nilai semakin minus IG ditentukan dengan membandingkan luas daerah di bawah kurva (Herdi, *et al.*, 2020).

HASIL DAN PEMBAHASAN

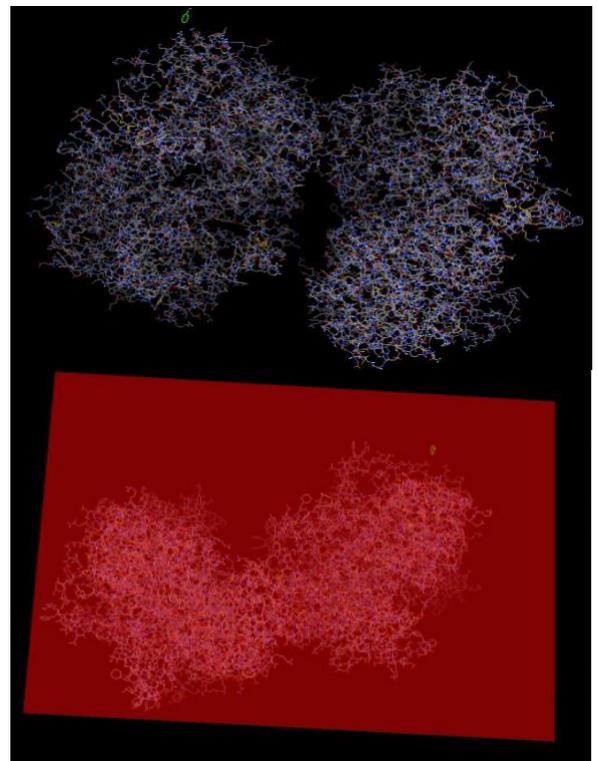
Ligan atau senyawa uji dalam penelitian ini adalah turunan fenolik daun kemangi (*Ocimum basilicum* L.) adalah senyawa fenolik dengan reseptor 6COX *cyclooxygenase-2* (prostaglandin *synthase-2*) *complexed with a selective inhibitor*, sc-558 in 1222 space group (Gambar 3), (Gambar 4) dan (Gambar 5).



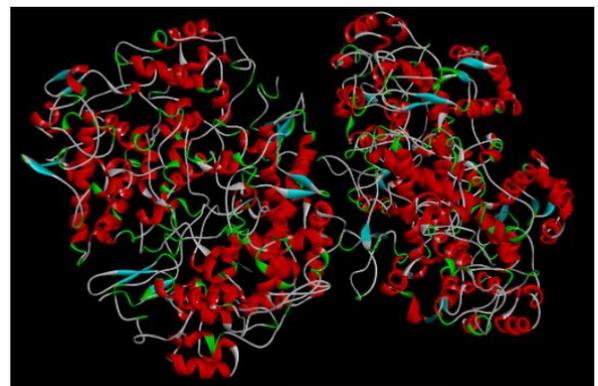
Gambar 3. Ligan



Gambar 4. Struktur 6COX *cyclooxygenase-2* (prostaglandin *synthase-2*) *complexed with a selective inhibitor*, sc-558 in 1222 space group belum di preparasi



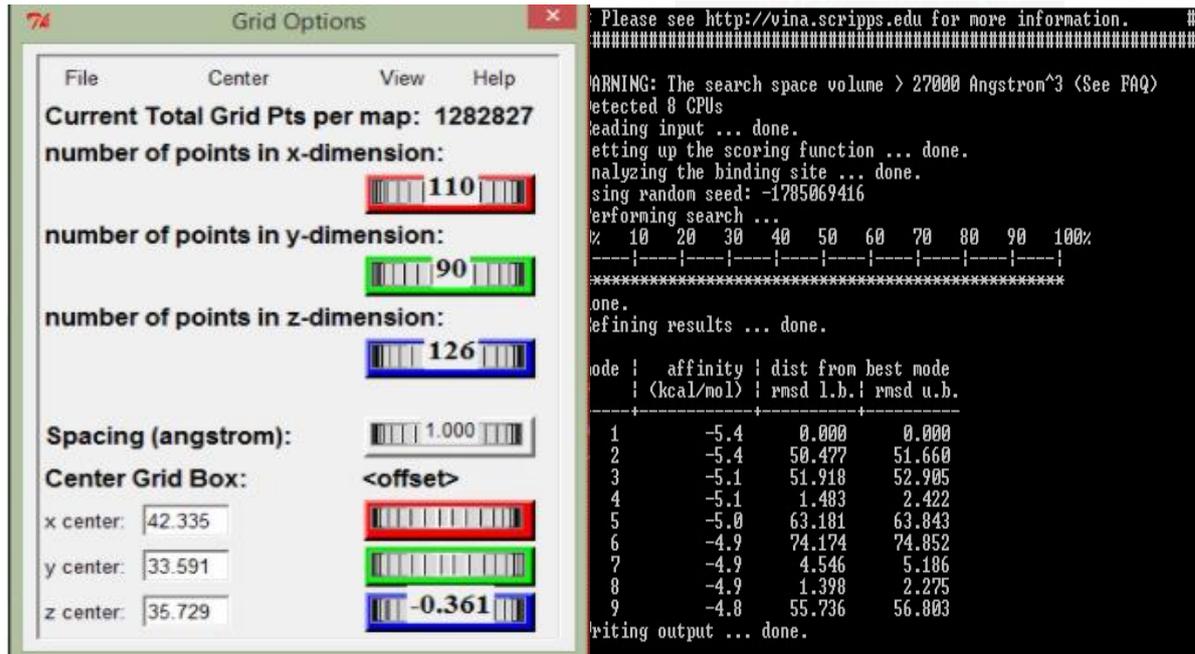
Gambar 5. Reseptor yang sudah di preparasi



Gambar 6. Ligan dan reseptor hasil docking

Parameter yang dianalisis dalam studi docking ini adalah residu asam amino, ikatan hidrogen, dan energi bebas ikatan (ΔG). Berdasarkan hasil docking, menunjukkan bahwa senyawa uji fenolik dapat berinteraksi dengan 6COX *cyclooxygenase-2*. Interaksi ligan-reseptor terjadi karena ada ikatan hidrogen, ikatan Van der Waals dan atau interaksi elektrostatik (Purwanto *et al.*, 2021) (Gambar 6).

Pada center grid box menggunakan nilai x center 42.335 kemudian y center 33.591 serta z center 35.729. Pada *cyclooxygenase-2* membentuk ikatan hidrogen pada residu asam amino pada fenolik. Oksigen dari senyawa uji membentuk dua ikatan hidrogen dengan atom O dan H pada yang memiliki jarak ikatan, sedangkan interaksi ligan-reseptor di terjadi antara satu atom N dengan C dari (Gambar 7).



Gambar 7. Visualisasi interaksi ligan-reseptor

Energi bebas ikatan (ΔG) menunjukkan kestabilan interaksi (ikatan) ligan dengan *cyclooxygenase-2* pada binding site. Semakin besar nilai energi bebas maka semakin stabil ikatan ligan dengan reseptor (Fitriasari, *et al.*, 2008). Senyawa aglikon kurkuligosida a memiliki nilai energi ikatan bebas yang besar (4.8 kkal/mol). Hasil ini menunjukkan bahwa senyawa fenolik mempunyai afinitas yang baik terhadap reseptor 6COX *cyclooxygenase-2* (Gambar 7).

KESIMPULAN

Berdasarkan molekular docking maka fenolik memiliki potensi aktivitas sebagai antiinflamasi karena memiliki afinitas dan membentuk ikatan hidrogen 6COX secara in-silico dan dapat dilanjutkan uji aktivitas secara in vitro di laboratorium untuk mendapatkan hasil sebagai antiinflamasi.

DAFTAR PUSTAKA

- Aldian H. Luntungan & Suptijah, P. (2017). Pengaruh Penyalutan Nanokitosan pada Kandungan Fenolik Ekstrak Daun Kemangi (*Ocimum basilicum* L). *J. Ilmu dan Teknologi Pangan*, 5(2), 20–25.
- Fitriasari, A., Wijayanti, N.K., Ismiyati, N., Dewi, D., Kundarto, W., Sudarmanto, A., Meiyanto, E. (2008). Studi Potensi Kurkumin dan Analognya sebagai Selective Estrogen Receptor Modulator (SERMs): Docking pada Reseptor Esterogen β . *Pharmacon*, Vol 9(1) : 27–32.
- Herdi Al Huda, B., Sugihartini, N., susanti, H., & Utami, D. (2020). Docking Molekular Senyawa B-Karoten dalam Tanaman Kelor (*Moringa oleifera* L.) sebagai Penghambat Enzim Tirosinase dengan Autodock – Vina. *Jurnal Insan*

Farmasi Indonesia, 3(2), 230–240.
<https://doi.org/10.36387/jifi.v3i2.540>

- Purwanto, D., Susanti, H., & Sugihartini, N. (2021). Docking Molekuler Potensi Anti Inflamasi Quersetin Daun Kelor (*Moringa oleifera* L.) dengan Autodock-Vina. *Jurnal Ilmiah Manusia dan Kesehatan*, 4(2), 309–313.
- Ragnhild, A.L., N.L. Asp, M. Axelsen, and A. Raben. (2004). Glycemic Index : Relevance for Health, Dietary Recommendations, and Nutritional Labelling. *Scandinavian J. Nutr.* 48 (2): 84-94.
- Rizky Arcinthy Rachmania, Hariyanti, Ririh Zikriah, Aditya Souldan. (2018). Studi In Silico Senyawa Alkaloid Herba Bakung Putih (*Crinum asiaticum* L.) pada Penghambatan Enzim Siklooksigenase (COX). *Jurnal Kimia VALENSI: Jurnal Penelitian dan Pengembangan Ilmu Kimia*, 4(2), November 2018, 124-136.
- Saputri, K.E., Fakhmi, N., Kusumaningtyas, E., Priyatama, D., Santoso, B. (2016). Docking Molekular Potensi Anti Diabetes Melitus Tipe 2 Turunan Zerumbon Sebagai Inhibitor Aldosa Reduktase dengan AutodockVina. Fakultas Farmasi, Universitas Muhammadiyah Surakarta.