

PENDAHULUAN

Inflamasi merupakan keadaan yang cenderung merugikan sebagai respon perlindungan tubuh untuk mengurangi dan menghilangkan pemicu terjadinya cedera dan infeksi.¹ Ciri inflamasi seperti edema, kemerahan, panas, nyeri, dan hilangnya fungsi, dapat menimbulkan penyakit tertentu yang tidak diinginkan, seperti demam, aterosklerosis, rheumatoid arthritis, bahkan kanker.²

Peradang sangat dipengaruhi oleh senyawa dan mediator yang dihasilkan oleh asam arakidonat. Enzim siklooksigenase (COX) yang terlibat dalam reaksi memiliki 2 isoform, yaitu COX-1 dan COX-2.³ Meskipun kedua enzim pada dasarnya berkerja dengan cara yang sama, penghambatan selektif dapat membuat perbedaan dalam hal efek samping iritasi lambung dan resiko ulserasi lambung.³

Alasan inilah ada kebutuhan untuk memiliki obat antiinflamasi dengan efek samping yang lebih ringan saat digunakan. Oleh karena itu, tumbuhan lebih banyak dipilih sebagai alternatif yang alami untuk pengobatan berbagai penyakit (Madhavi et al., 2012). Basis data khusus untuk *lead compounds* berbasis herbal sudah banyak dikembangkan. Informasi dari basis data herbal tersebut sudah banyak dijadikan sumber data untuk penelitian *molecular simulation* salah satunya adalah penambatan molekuler (*molecular docking*).

Tumbuhan asam Jawa (*Tamarindus indica* L.) merupakan salah satu tumbuhan yang banyak dibudidayakan di Negara tropis sehingga dapat dengan mudah ditemukan termasuk di Indonesia. Bagian yang digunakan antara lain bagian daun, kulit batang, daging buah, dan juga bijinya. Kandungan metabolit sekunder dalam ekstrak daun *Tamarindus indica* L. berupa senyawa aktif flavonoid yang dapat digunakan sebagai antioksidan, antibakteri dan antiinflamasi.⁴

Pada penelitian sebelumnya telah ditemukan efek antiinflamasi dari ekstrak daun asam jawa dengan menggunakan metode *in vivo*, metode ini merupakan pengujian gambaran hasil respon tubuh terhadap suatu senyawa uji. Namun, pengujian *in vivo* ini memerlukan waktu yang cukup lama dalam dan materi yang tidak sedikit dalam menentukan hasil pengujiannya. Dalam hal ini peneliti ingin melakukan uji *in silico* sebagai pengujian lanjutan dalam pengembangan obat dari senyawa alami sebagai kandidat obat.

In silico merupakan metode pengembangan obat saat ini yang paling baik dan populer yang berdasarkan pendekatan komputasi. Metode komputasi ini telah dikembangkan dan banyak digunakan untuk pengembangan hipotesis farmakologi dan pengujian rancangan struktur molekul dan aktivitas biologisnya, atas dasar penalaran yang sistematis dan rasional.

Morris *et al.* menyatakan penambatan molekuler merupakan kunci dalam perangkat perancangan obat yang merupakan kombinasi teknik komputasi dan data struktur molekul biologi untuk memprediksi bentuk ikatan yang dominan antara ligan dengan targetnya yang struktur tiga dimensinya diketahui. Tujuan dari aplikasi

penambatan molekuler adalah untuk memahami dan memprediksi interaksi ligan-protein, baik mencari mode ikatan yang baik secara struktur maupun memprediksi afinitas ikatan berdasarkan energi. Farmakofor berbasis struktur (SBPs) adalah metode alternatif untuk pendekatan berbasis ligan dan memiliki keuntungan untuk menggambarkan keseluruhan kemampuan interaksi dari kantong pengikat.⁵

Tujuan penelitian ini adalah untuk mendapatkan kandidat senyawa baru yang diprediksi memiliki aktivitas sebagai antiinflamasi selektif inhibitor COX-2 berasal dari senyawa aktif daun asam jawa sehingga dapat menjadi alternatif sumber bahan baku obat yang dapat memberikan manfaat bagi masyarakat, dengan potensi efek yang setara atau lebih dari pada ligan pembanding, tetapi memiliki efek samping yang lebih minimal, serta dapat dimanfaatkan untuk penelitian selanjutnya.