

**PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL
SENYAWA KIMIA DAUN GINGGYANG (*Leea aequata*. L) TERHADAP
RESEPTOR 5-HT SEBAGAI ANTIDEPRESAN**

**WULAN MAULANI SURYANTI
201FF03188**

Program Studi S1 Farmasi. Fakultas Farmasi
Universitas Bhakti Kencana

ABSTRAK

Depresi adalah kelainan yang mempengaruhi seseorang secara emosional, fisiologis, kognitif, dan perilaku serta mengubah pola dan respons normal. Berdasarkan data Rikesdas 2018, prevalensi depresi di Indonesia pada penduduk usia 15 tahun keatas dengan persentase sebesar 6,1% yaitu sekitar 12 juta jiwa. Obat antidepresan penghambatan reuptake inhibitor bekerja dengan menghambat transporter serotonin dan atau norepinefrin. *Selective Serotonin Reuptake Inhibitors* (SSRI) merupakan antidepresi lini pertama. Obat ini dilaporkan berinteraksi dengan 40 obat lain dan menyebabkan sindrom serotonin, untuk itu perlu adanya alternatif terapi inhibitor 5-HT. Genus *Leea* mengandung sejumlah senyawa yang memiliki aktivitas obat penenang dan antidepresi. Penelitian ini bertujuan untuk mencari senyawa dalam tanaman *Leea aequata*.L yang memiliki afinitas terhadap reseptor 5-HT serta pencarian senyawa yang berpotensi sebagai inhibitor 5-HT (PDB ID : 5I71) untuk antidepresan. Penelitian ini dilakukan pada 30 senyawa dari *Leea aequata*.L, menggunakan metode penambatan molekul dengan parameter pengamatan K_i dan ΔG , serta Simulasi dinamika molekul dengan parameter pengamatan RMSD, RMSF dan MMGBSA. Hasil penambatan molekul, terdapat 5 senyawa yang memiliki nilai K_i pada skala μM , berpotensi sebagai inhibitor 5-HT. Hasil simulasi dinamika molekul dari 5 senyawa tersebut 1 diantaranya yaitu apigenin 7-O-(2-O-arhamnosyl) glucuronide memiliki stabilitas interaksi lebih baik dari ligan alami sebagai inhibitor 5-HT. Namun keempat senyawa lainnya yaitu N-trans-feruloyltyramine, trans-n-p-coumaroyl tyramine, Kaempferol 3-O-glucoside, dan Luteolin 7-O-glucuronide masih memiliki potensi sebagai inhibitor 5-HT.

Kata kunci : antidepresan, *Leea Aequata*.L, penambatan molekul, simulasi dinamika molekul, 5-HT.

**MOLECULAR DOCKING AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF
CHEMICAL COMPOUNDS FROM GINGGYANG LEAVES (*Leea aequata*. L)
AGAINST 5-HT RECEPTORS AS ANTIDEPRESSANTS**

**WULAN MAULANI SURYANTI
201FF03188**

*Undergraduate Program in Pharmacy, Faculty of Pharmacy
Bhakti Kencana University*

ABSTRACT

Depression is a condition that affects an individual emotionally, physiologically, cognitively, and behaviorally, altering normal patterns and responses. According to Rikesdas 2018 data, the prevalence of depression among Indonesians aged 15 and older is 6.1%, which equates to approximately 12 million people. Antidepressants that work as reuptake inhibitors function by blocking serotonin and/or norepinephrine transporters. Selective Serotonin Reuptake Inhibitors (SSRIs) are considered first-line antidepressants. These medications have been reported to interact with 40 other drugs and can cause serotonin syndrome, highlighting the need for alternative 5-HT inhibitor therapies. The genus *Leea* contains several compounds with sedative and antidepressant activities. This study aims to identify compounds in *Leea aequata* L. that have an affinity for 5-HT receptors and to search for compounds with potential as 5-HT inhibitors (PDB ID: 5I71) for antidepressant use. The study was conducted on 30 compounds from *Leea aequata* L., using molecular docking methods with observations of K_i and ΔG parameters, and molecular dynamics simulations with observations of RMSD, RMSF, and MMGBSA parameters. Molecular docking results identified 5 compounds with K_i values on the μM scale, suggesting potential as 5-HT inhibitors. Among these, apigenin 7-O(2-O-arhamnosyl) glucuronide demonstrated better interaction stability compared to natural ligands as a 5-HT inhibitor. However, the other four compounds—*N*-trans-feruloyltyramine, trans-*n*-p-coumaroyl tyramine, Kaempferol 3-O-glucoside, and Luteolin 7-O-glucuronide—also show potential as 5-HT inhibitors.

Keywords: antidepressant, *Leea aequata*. L., molecular docking, molecular dynamics simulation, 5-HT.