

ABSTRAK**PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL
SENYAWA KIMIA YANG TERKANDUNG DALAM DAUN LEEA AEQUATA
SEBAGAI AGONIST GABA (B).****Oleh :****Azriel Nugraha****191FF03041**

Kejang otot adalah kontraksi otot yang tidak normal dan menyakitkan yang bisa disebabkan oleh cedera tulang belakang. Cedera tulang belakang bisa mengganggu sinyal saraf yang berkaitan dengan reseptor GABA (B), yaitu reseptor yang menghambat aktivitas saraf dan mengendalikan gerakan otot. Daun leea aequata adalah tanaman obat tradisional yang diklaim dapat mengatasi kejang otot. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji potensi senyawa daun leea aequata sebagai antikejang melalui penghambatan reseptor GABA(B) dengan menggunakan metode penambatan molekul dan simulasi dinamika molekul. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa ada sembilan senyawa daun leea aequata yang memiliki afinitas tinggi terhadap reseptor GABA (B), dengan energi ikatan antara -8,23 hingga -9,46 kcal/mol dan konstanta inhibisi antara 0,11556 hingga 0,93523 μ M. Tetapi hanya tiga senyawa yang stabil dan memiliki energi pengikatan terendah, yaitu (6S,9R)-roseoside, (6S,9S)-Roseoside, dan trans-n-p-coumaroyl tyramine. Senyawa-senyawa ini memiliki nilai RMSD di bawah 0,5 Å, nilai RMSF di bawah 1 Å, ikatan hidrogen lebih dari 3, dan energi pengikatan MMGBSA -12,0731, -2,9015, dan -12,9181 kcal/mol. Senyawa-senyawa ini berpotensi sebagai antikejang akibat cedera tulang belakang. Namun, senyawa-senyawa ini perlu dioptimalkan lebih lanjut dan diuji secara in vitro maupun in vivo untuk membuktikan efektivitasnya sebagai obat antikejang.

Kata Kunci : antikejang, daun ginggiyang, penambatan molekul, reseptor GABA(B), simulasi dinamika molekul.

ABSTRACT
MOLECULAR DOCKING AND MOLECULAR DYNAMICS OF CHEMICAL
COMPOUNDS CONTAINED IN LEEA AEQUATA LEAVES AS AGONIST GABA (B).

By:
Azriel Nugraha
191FF03041

Muscle spasms are abnormal and painful muscle contractions that can be caused by spinal cord injury. Spinal cord injury can disrupt nerve signals related to GABA (B) receptors, which are receptors that inhibit nerve activity and control muscle movement. Leea aequata leaf is a traditional medicinal plant that is claimed to treat muscle spasms. This study aims to assess the potential of leeaequata leaf compounds as anticonvulsants through inhibition of GABA(B) receptors using molecular tethering methods and molecular dynamics simulations. The results of this study indicate that there are nine leeaequata leaf compounds that have high affinity for GABA (B) receptors, with binding energies between -8.23 to -9.46 kcal/mol and inhibition constants between 0.11556 to 0.93523 μ M. But only three compounds were stable and had the lowest binding energy, namely (6S,9R)-roseoside, (6S,9S)-Roseoside, and trans-n-p-coumaroyl tyramine. These compounds have RMSD values below 0.5 Å, RMSF values below 1 Å, hydrogen bonds of more than 3, and MMGBSA binding energies of -12.0731, -2.9015, and -12.9181 kcal/mol. These compounds have potential as anti-seizures due to spinal cord injury. However, these compounds need to be further optimized and tested in vitro and in vivo to prove their effectiveness as anticonvulsant drugs.

Keywords: anticonvulsant, leeaequata leaf, GABA(B) receptor, molecular tethering, molecular dynamics simulation.