

ABSTRAK

**PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL
SENYAWA DARI TANAMAN HERBA PEGAGAN (*Centella asiatica* (L))
SEBAGAI INHIBITOR RENIN**

Oleh :

Pebi Pebrianti

11181035

Hipertensi merupakan suatu keadaan berupa tekanan darah lebih dari batas normal. Aktivasi renin dapat mengkatalis angiotensinogen menjadi angiotensin I. Angiotensin I diubah menjadi angiotensin II oleh ACE dan berikatan dengan reseptor AT-1 yang merupakan salah satu tempat yang memperantarai terjadinya vasokonstriksi sehingga dapat menyebabkan peningkatan darah tinggi. Oleh sebab itu, enzim renin dapat menjadi salah satu target kerja antihipertensi dengan cara menginhibisi enzim renin tersebut. Herba pegagan (*Centella asiatica* (L.)) diketahui juga memiliki efek antihipertensi, namun senyawa dan mekanisme kerja yang berperan belum diketahui. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis afinitas dan interaksi serta mengkaji stabilitas interaksi ikatan senyawa uji dari herba pegagan terhadap enzim renin pada keadaan yang mendekati fisiologis tubuh. Penelitian dilakukan secara *in silico* dengan metode penambatan molekul dan simulasi dinamika molekul yang melibatkan 47 senyawa uji dari herba pegagan. Hasil penelitian dari data penambatan molekul terdapat 10 senyawa uji terbaik dengan nilai energi bebas ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (K_i) mendekati ligan alami. Kemudian untuk hasil simulasi dinamika molekul, senyawa uji yang memiliki kestabilan yang baik mendekati ligan alami yaitu senyawa uji Castiriferol (SU16). Maka, dapat disimpulkan senyawa Castiliferol (SU16) berpotensi untuk dijadikan inhibitor renin.

Kata kunci : *Centella asiatica* (L), penambatan molekul, dinamika molekul, renin.

ABSTRACT**MOLECULAR DOCKING AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF
COMPOUND FROM THE GOTU KOLA HERB (*Centella asiatica* (L)) AS AN
INHIBITOR RENIN****By :*****Pebi Pebrianti*****11181035**

Hypertension is a condition in which blood pressure is higher than the normal limit. Renin activation can catalyze angiotensinogen to angiotensin I. Angiotensin I is converted to angiotensin II by ACE and binds to the AT-1 receptor which is one of the sites that mediate vasoconstriction so that it can cause an increase in high blood pressure. Therefore, the renin enzyme can be one of the targets of antihypertensive action by inhibiting the renin enzyme. The gotu kola herb (*Centella asiatica* (L.)) is also known to have an antihypertensive effect, but the compound and its mechanism of action are not yet known. This study aims to analyze the affinity and interaction as well as to examine the stability of the bonding interaction of the test compound from the gotu kola herb to the renin enzyme in conditions close to the body's physiology. The research was conducted *in silico* with molecular anchoring method and molecular dynamics simulation involving 47 test compounds from gotu kola herb. The results of the research from molecular anchoring data, there were 10 best test compounds with bond free energy values (ΔG) and inhibition constants (K_i) close to natural ligands. Then for the molecular dynamics simulation results, the test compound that has good stability is close to the natural ligand, namely the test compound Castiriferol (SU16). It can be concluded that Castilipherol (SU16) has the potential to be used as a renin inhibitor.

Keywords: *Centella asiatica* L, molecular docking, molecular dynamics, renin.