

ABSTRAK

PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL SENYAWA KIMIA DARI PALA (*Myristica fragrans* Houtt.) TERHADAP ANGIOTENSIN CONVERTING ENZYME (ACE) SEBAGAI KANDIDAT ANTI – HIPERTENSI

Rejma Rahmah Faujiah

201FF03082

Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi

Universitas Bhakti Kencana

Hipertensi adalah salah satu masalah kesehatan yang paling berbahaya di dunia, ditandai dengan terjadi peningkatan tekanan darah secara kronis yang dapat menjadi faktor risiko penting terhadap penyakit kardiovaskular. *Angiotensin Converting Enzyme Inhibitor* (ACE – I) merupakan obat anti – hipertensi yang sampai saat ini telah teruji aman. Dalam pengobatan tradisional Pakistan, pala telah digunakan untuk mengobati hipertensi. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengidentifikasi senyawa dalam biji pala yang mempunyai potensi aktivitas bioaktif sebagai terapi antihipertensi. Dalam Pengujian ini dilakukan dengan metode *in silico* atau metode yang menggunakan komputasi. Metode pendekatan yang dilakukan yaitu penambatan molekul menggunakan software AutoDock dan simulasi dinamika molekul menggunakan AMBER 18. Hasil dari penambatan molekul diperoleh 23 ligan uji yang memiliki energi bebas ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (K_i) yang lebih rendah dibandingkan dengan ligan alami. Berdasarkan hasil simulasi dinamika molekul menunjukkan bahwa terdapat 2 ligan uji yang memiliki stabilitas interaksi lebih baik dibandingkan dengan ligan alaminya kaptopril yaitu, Myrcene dan Isoboldine. Hasil tersebut berdasarkan parameter nilai RMSD, RMSF dan MM/GBSA. Dapat disimpulkan bahwa senyawa tersebut berpotensi sebagai kandidat senyawa obat antihipertensi karena mempunyai afinitas yang lebih rendah dibandingkan dengan ligan alaminya.

Kata Kunci : Hipertensi, *Angiotensin Converting Enzyme*, Biji Pala (*Myristica fragrans*), *In Silico*.

ABSTRACT

MOLECULAR ADDITION AND SIMULATION OF MOLECULAR DYNAMICS OF CHEMICAL SOURCES FROM NUTMEG (*Myristica fragrans* Houtt.) TO ANGIOTENSIN CONVERTING ENZYME (ACE) AS ANTI-HYPERTENSION GUIDELINES

Rejma Rahmah Faujiah

201FF03082

Bachelor of Pharmacy Study Programme, Faculty of Pharmacy

Bhakti Kencana University

Hypertension is one of the world's most dangerous health problems, characterised by chronically elevated blood pressure which can be an important risk factor for cardiovascular disease. Angiotensin Converting Enzyme Inhibitors (ACE-I) are anti-hypertensive drugs that have been tested to be safe. In Pakistani traditional medicine, nutmeg has been used to treat hypertension. The aim of this study was to identify compounds in nutmeg seeds that have potential bioactive activity as antihypertensive therapy. This test was conducted using in silico method or computational method. The approach method used was molecular tethering using AutoDock software and molecular dynamics simulation using AMBER 18. The results of molecular tethering obtained 23 test ligands that have lower binding free energy (ΔG) and inhibition constant (K_i) compared to natural ligands. Based on the results of molecular dynamics simulations, there are 2 test ligands that have better interaction stability compared to the natural ligand captopril, namely, Myrcene and Isoboldine. These results are based on the parameters of RMSD, RMSF and MM/GBSA values. It can be concluded that the compound has potential as a candidate antihypertensive drug compound because it has a lower affinity compared to its natural ligand.

Keywords: Hypertension, Angiotensin Converting Enzyme, Nutmeg Seed (*Myristica fragrans*), In Silico.