

ABSTRAK**Studi Penambatan Molekul dan Dinamika Molekul Senyawa dari Pegagan (*Centella asiatica*) Terhadap Reseptor β 1 Adrenergik Sebagai Antihipertensi****Oleh:****Delfritama Ibadillah****11181153**

Penyakit tekanan darah tinggi atau hipertensi menjangkit lebih dari 658.000 orang di Indonesia. Penanganan hipertensi salah satunya melalui antagonis reseptor β 1 adrenergik atau β -bloker. Namun β -bloker memiliki efek samping. Sehingga perlu ditemukan alternatif yang memiliki efek utama yang sama atau lebih baik dibandingkan β -bloker yang beredar saat ini. Ekstrak pegagan diketahui memiliki aktivitas antihipertensi, namun belum ada laporan senyawa yang bertanggung jawab pada aktivitas antihipertensi. Penelitian ini dilakukan untuk mencari senyawa yang berpotensi sebagai β -bloker dari tanaman pegagan (*Centella asiatica*) secara *in silico*. Sebanyak 47 senyawa tanaman pegagan ditambatkan ke reseptor β 1 adrenergik menggunakan aplikasi AutoDock 4.2.6. Diperoleh 9 senyawa dengan nilai skoring penambatan lebih baik dari ligan pembanding, yaitu naringin (L40), castillicetin (L15), castilliferol (L16), rutin (L44), kaempferol-7-ramnosida (L32), campesterol (L12), madasiatic acid (L35), pomolic acid (L42), dan astragalin (L7); dengan nilai K_i berturut-turut adalah 0,00348; 0,011; 0,01449; 0,02099; 0,02651; 0,0641; 0,09379; 0,19698; dan 0,21276 μ M. Sembilan pose terbaik ini, dilanjutkan ke tahap simulasi dinamika molekul. Berdasarkan simulasi dinamika molekul, diperoleh bahwa kaempferol-7-ramnosida (L32) memiliki stabilitas terbaik ditandai nilai RMSF sisi aktif yang rendah, ikatan hidrogen yang stabil, dan energi bebas ikatan yang lebih baik daripada atenolol. Dapat disimpulkan, kaempferol-7-ramnosida (L32) berpotensi sebagai kandidat senyawa pemandu β -bloker.

Kata kunci: Beta-bloker, *Centella asiatica*, Dinamika molekul, Hipertensi, Penambatan molekul

ABSTRACT**Molecular Docking and Molecular Dynamics Study of Pegagan (*Centella asiatica*)
Phytochemicals against β 1 Adrenergic Receptors as Antihypertensive****By:****Delfritama Ibadillah****11181153**

High blood pressure or hypertension affects more than 658,000 people in Indonesia. One of the ways to treat hypertension is through β 1 adrenergic receptor antagonist or β -blockers. However, β -blockers have side effects. Thus, it is necessary to find an alternative that has the same main effect or better than the currently available β -blockers. Pegagan extract is known to have antihypertensive activity, but there are no reports of compounds responsible for antihypertensive activity. This research was conducted to find compounds that have the potential as β -blocker from pegagan (*Centella asiatica*). A total of 47 pegagan phytochemicals were docked into β 1 adrenergic receptor using the AutoDock 4.2.6. There were 9 compounds with better inhibition constant scores than the comparison ligands, namely naringin (L40), castillicetin (L15), castilliferol (L16), rutin (L44), kaempferol-7-rhamnoside (L32), campesterol (L12), madasiatic acid (L35), pomolic acid (L42), dan astragalin (L7); with K_i values 0.00348; 0.011; 0.01449; 0.02099; 0.02651; 0.0641; 0.09379; 0.19698; and 0.21276 μ M, respectively. These nine best poses proceed to the molecular dynamic simulation stage. Based on molecular dynamics simulations, it was found that Kaempferol-7-rhamnoside (L32) had the best stability, characterized by low RMSF values for the active side, stable hydrogen bonds, and better binding free energy than the atenolol. It can be concluded that Kaempferol-7-rhamnoside (L32) has potential as a β -blockers alternative.

Keywords: Beta-blocker, *Centella asiatica*, Hypertension, Molecular Docking, Molecular Dynamic