

ABSTRAK**DOCKING DAN DINAMIKA MOLEKUL SENYAWA AKTIF DARI TANAMAN
HERBA PEGAGAN (*Centella asiatica* (L)) TERHADAP ALPHA-2 ADRENERGIC
SEBAGAI ANTIHIPERTENSI****Oleh :****Nursafitri Diah Lestari****11181091**

Hipertensi merupakan suatu penyakit yang terjadi akibat naiknya tekanan darah sistolik dan diastolik. Salah satu pengobatan hipertensi bisa menggunakan *clonidine* yang termasuk ke dalam golongan vasodilator. Akibat dari penggunaan *clonidine* yang memiliki banyak efek samping yang dapat ditimbulkan maka digunakan bahan alam yaitu tanaman pegagan (*Centella asiatica* L.) yang diketahui memiliki efek sebagai antihipertensi. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan afinitas dari 47 senyawa pada tanaman pegagan sebagai antihipertensi golongan vasodilator. Penelitian dilakukan secara *in silico* dengan metode *docking* dan dinamika molekul. Dari hasil pengujian *docking* yang telah dilakukan terdapat 37 ligan uji memiliki nilai energi bebas ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (K_i) yang lebih baik dari *clonidine*. Hasil dinamika molekul, ligan uji *betulinic acid* memiliki kestabilan interaksi dan nilai ΔG yang lebih baik dari *clonidine* yang memiliki nilai energi bebas total -31,2346 kcal/mol.

Kata Kunci : *Centella asiatica* L, *Clonidine*, , Dinamika Molekul, *Docking*, Vasodilator.

ABSTRACT***DOCKING AND MOLECULAR DYNAMIC ACTIVE COMPOUND HERBA OF
ASIATIC PENNYWORTH (Centella asiatica (L)) AT ALPHA-2 ADRENERGIC AS
ANTIHYPERTENSIVE*****By :****Nursafitri Diah Lestari****11181091**

Hypertension is a disease that result from a rise in systolic and diastolic blood pressure. One of the treatment for hypertensive can use clonidine which belongs to the vasodilator group. As a result of the extensive side effect of the use of clonidine, natural agents of the pennyworth (Centella asiatica L.) are known to have an antihypertensive effect. The studi aims to determine the affinity of 47 compounds in pennyworth as antihypertensives of the vasodilator grup. The research was conducted in silico with docking method and molecular dynamics. From the result of docking test that has been carried out, 37 test ligands that have bond-free energy values (ΔG) and inhibition constants (K_i) that are better than clonidine. As a result of molecular dynamics, the SP11 test ligand has better interaction stability and ΔG value than clonidine which has a total energy values of -31,2346 kcal/mol.

Keywords : *Centella asiatica L, Clonidine, Molecular Dynamics, Docking, Vasodilator*