

**STUDI PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA
MOLEKUL SENYAWA KIMIA DARI DAUN SENGGANI (*Melastoma
malabathricum L*) TERHADAP RESEPTOR ANGIOTENSIN
CONVERTING ENZYM (ACE) SEBAGAI ANTIHIPERTENSI**

**M Mipta Husurul
211FF03131**

Program studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi
Universitas Bhakti Kencana

ABSTRAK

Hipertensi merupakan salah satu masalah kesehatan global yang signifikan dan menjadi penyebab utama kematian akibat penyakit kardiovaskular. Penghambat enzim pengubah angiotensin (ACE inhibitor) banyak digunakan dalam terapi hipertensi. Daun Senggani (*Melastoma malabathricum L.*) diketahui memiliki kandungan senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai antihipertensi. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa aktif dari daun Senggani sebagai inhibitor ACE melalui pendekatan *in silico* menggunakan metode *molecular docking* dan *molecular dynamics simulation*. Penelitian dilakukan dengan menambatkan 37 senyawa dari daun Senggani terhadap reseptor ACE (kode PDB: 2X91) menggunakan perangkat lunak AutoDock, disertai validasi metode dengan nilai $RMSD \leq 2 \text{ \AA}$. Tiga senyawa terbaik yang diperoleh berdasarkan nilai energi bebas ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (K_i) terendah adalah DS5, DS20, dan DS34. Senyawa tersebut kemudian dianalisis lebih lanjut menggunakan simulasi dinamika molekul dengan perangkat lunak AMBER selama 100 ns untuk menilai kestabilan interaksi kompleks reseptor-ligan. Hasil menunjukkan bahwa DS5 dan DS34 memiliki nilai RMSD yang stabil ($\leq 2,5 \text{ \AA}$), fluktuasi residu aktif yang rendah (RMSF), serta kontribusi energi total yang paling negatif berdasarkan perhitungan MMGBSA, menandakan kestabilan kompleks yang tinggi. Meskipun ligan alami menunjukkan interaksi ikatan hidrogen lebih dominan, DS5 dan DS34 menunjukkan performa termodinamika yang lebih baik dan interaksi stabil pada situs aktif enzim ACE. Dapat disimpulkan bahwa senyawa DS5 dan DS34 dari daun Senggani memiliki potensi kuat sebagai kandidat obat antihipertensi alami dengan mekanisme penghambatan enzim ACE. Studi ini mendukung pengembangan lebih lanjut melalui uji *in vitro* dan *in vivo*.

Kata kunci: Daun Senggani, *in silico*, molecular docking, ACE, antihipertensi, dinamika molekul.

QUANTITATIVE DETERMINATION OF MICONAZOLE NITRATE AND HYDROCORTISONE ACETATE IN CREAM FORMULATION BY THIN LAYER CHROMATOGRAPHY WITH VIDEO DENSITOMETRY

M Mipta Husurul

211FF03131

Program studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi
Universitas Bhakti Kencana

ABSTRACT

Hypertension is a major global health issue and a leading cause of death due to cardiovascular diseases. Angiotensin-converting enzyme (ACE) inhibitors are widely used in the pharmacological management of hypertension. *Melastoma malabathricum* L. (Senggani leaves) contains various bioactive compounds that are potentially antihypertensive. This study aimed to evaluate the inhibitory potential of active compounds from Senggani leaves against ACE through *in silico* approaches using molecular docking and molecular dynamics simulations. A total of 37 compounds were docked against ACE receptor (PDB ID: 2X91) using AutoDock, with validation through redocking that yielded RMSD values ≤ 2 Å. The three best compounds—DS5, DS20, and DS34—were selected based on the lowest binding free energy (ΔG) and inhibition constant (K_i). These were further analyzed using molecular dynamics simulations in AMBER for 100 ns to assess the stability of the ligand-receptor complexes. The results showed that DS5 and DS34 exhibited stable RMSD values (≤ 2.5 Å), low RMSF on active site residues, and the most favorable binding free energy based on MMGBSA calculations, indicating thermodynamic stability of the complexes. Although the native ligand formed more frequent hydrogen bonds, DS5 and DS34 demonstrated superior energetic and conformational stability at the ACE binding site. In conclusion, DS5 and DS34 from *Melastoma malabathricum* L. exhibit strong potential as natural antihypertensive agents targeting ACE. These findings support further investigation through *in vitro* and *in vivo* studies.

Keywords: *Melastoma malabathricum*, *in silico*, molecular docking, ACE, antihypertensive, molecular dynamics.