



VOL 5, NO 2, DESEMBER 2024



# BIOFAAL JOURNAL

BIOLOGI, FAAL HEWAN, FAAL TUMBUHAN, FAAL MANUSIA, FAAL OLAHRAGA  
JURUSAN BIOLOGI FST UNIVERSITAS PATTIMURA  
IKATAN AHLI ILMU FAAL INDONESIA



*Intsia bijuga*  
Photographed by D. E. Sahertian

**E-ISSN: 2723 - 4959**

# BIOFAAL JOURNAL

E-ISSN 2723-4959  
Volume 5 Number 2 | Desember 2024

## EDITOR IN CHIEF

Laury Marcia Ch. Huwae, S.Si., M.Si

## Associate Editor

Efraim Samson, S.Si., M.Si

Dr. Windi Mose, S.Pd

Edwin T Apituley, S.Si., M.Si

## Expert Editor Board

Dr. Ir. Alfred O. M. Dima, M.Si (Universitas Nusa Cendana, Kupang)

Dr. Safrida, S.Pd., M.Si (Universitas Syiah Kuala, Aceh)

Dr. dr. Yetty Machrina, M.Kes, AIFO-K (Universitas Sumatera Utara, Medan)

Dr. Saidah Rauf, S.Kep., M.Sc (Politeknik Kesehatan Kemenkes Maluku, Masohi)

Dr. Maria Nindatu, M.Kes (Universitas Pattimura, Ambon)

Dr. Theopilus W Watuguly, M.Kes., AIFO (Universitas Pattimura, Ambon)

Dr. Handy Erwin Pier Leimena, S.Si., M.Si (Universitas Pattimura, Ambon)

Dr. Cecilia A Seumahu, S.Si., M.Si (Universitas Pattimura, Ambon)

Dr. Adrian Jems Akiles Unity, S.Si., M.Si., AIFO (Universitas Pattimura, Ambon)

Dr. Meilissa C. Mainassy, S.Si., M.Si (Universitas Pattimura, Ambon)

## Asistant Editorial

Abdul M Ukratalo, S.Si., M.Si

Brian Saputra Manurung, S.Si., M.Sc

Kristi Lenci Patty, S.Si., M.Si

Fuadiska Salamena, S.Si., M.Si

## Publisher

Jurusan Biologi Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Pattimura,  
bekerja sama dengan  
Ikatan Ahli Ilmu Faal Indonesia (IAIFI)

## Editorial Address

Jurusan Biologi - Fakultas Sains dan Teknologi  
Universitas Pattimura

Jl. Ir. M. Putuhena, Kampus Poka, Ambon, 97234, Maluku, Indonesia

E-mail : [biofaaljournal@gmail.com](mailto:biofaaljournal@gmail.com)



**E-ISSN: 2723 - 4959**



**DAFTAR ISI**

1. **HUBUNGAN KEDALAMAN DAN WAKTU PENGAMATAN DENGAN JUMLAH SPAT KERANG HIJAU (*Perna viridisi*) DIPERAIRAN PANTAI DESA WAIHERU, TELUK AMBON BAGIAN DALAM** 074-083  
(Mujahiddin Permata Roman Rettob, La Eddy dan Sanita Suriani)
2. **ANALISIS FAKTOR-FAKTOR INTERNAL DAN EKSTERNAL YANG MENINGKATKAN IBU HAMIL MENGANDUNG ANAK DOWN SYNDROM** 084-090  
(Lisnur Isnaeni Kusmantioko, Ni'mah Alawiyah Safitri, Ivolia Indah Uswatun Khasanah)
3. **PENGARUH EKSTRAK ETANOL DAUN MANGKOKAN (*Nothopanax scutellarium*) SEBAGAI ANTIBAKTERI *Vibrio sp*** 091-099  
(Marthinus Imanuel Halaay Hanoatubun, Hendro Hitijahubessy, Sesilia Fangohoi, Bruri Berel Tumiwa, Jakomina Metungun, Usman Madubun)
4. **LITERATUR REVIEW: TANAMAN TENGGAWANG (*Shorea spp*) DI KALIMANTAN BARAT** 100-106  
(Filardha Azelia Vallahayil, Syamswisna, Rifka Elsyah Suhardi, Wilma<sup>1</sup>, Mira Tirta Yani dan Luviana Putri)
5. **PENGARUH PENAMBAHAN MADU GALO-GALO TERHADAP AKTIVITAS ANTIBAKTERI KOMBUCHA KULIT NANAS DAN AIR KELAPA** 107-115  
(Linda Wati, Novelina, Reni Koja dan Ratni Kumala Sari)
6. **BIOAKTIF ALAMI DARI TAPAK DARAH (*Catharanthus roseus*) TERHADAP PENYAKIT HIPERTENSI DENGAN PENDEKATAN DASAR PENELITIAN IN SILICO** 116-122  
(Monalisa P J Taihuttu, Fernando A Watung dan Yudrik A Latief)
7. **NILAI *TOTAL PLATE COUNT* (TPC) BUBUR BAYI HOME INDUSTRY** 123-129  
(Janan Salma Nabilah Sumantri, Wulan Fitriani Safari dan Septiani)
8. **STRUKTUR POPULASI DAN POLA DISTRIBUSI PALA (*Myristica fragrans* Houtt) PADA PERKEBUNAN PALA DI DUSUN MANGKOBATU BANDA NEIRA MALUKU TENGAH** 130-138  
(Gielly Lawansuka, Evelin Tuhumuri dan Dece Elisabeth Sahertian)



## BIOAKTIF ALAMI DARI TAPAK DARAH (*Catharanthus roseus*) TERHADAP PENYAKIT HIPERTENSI DENGAN PENDEKATAN DASAR PENELITIAN IN SILICO

### NATURAL BIOACTIVE COMPOUNDS FROM *Catharanthus roseus* AGAINST HYPERTENSION USING AN IN SILICO RESEARCH APPROACH

Monalisa P J Taihuttu<sup>1\*</sup>, Fernando A Watung<sup>2</sup> dan Yudrik A Latief<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Program Studi Biologi Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Pattimura, Ambon – Indonesia

<sup>2</sup> Fakultas MIPA, Universitas Negeri Manado, Manado – Indonesia

<sup>3</sup> PT BISI INTERNASIONAL, Tbk. Jawa timur – Indonesia

\*Corresponding Author e-mail: monalisa.taihuttu@lecturer.unpatti.ac.id

#### ABSTRACT

**Keywords:** Ajmalicine is a natural secondary metabolite compound found in the *Catharanthus roseus* plant, which has potential as an antihypertensive agent. Docking simulations were used to explore the molecular interactions between Ajmalicine and its identified target protein, the Alpha-2A adrenergic receptor, using three servers: PharmMapper, SwissTargetPrediction, and SuperPred. The analysis was supported by software such as PyMOL and LigPlus, Discovery Studio 2016 Client, and PyRx 0.8. The results showed that Ajmalicine interacts with the target protein, and this interaction was compared with a control compound, Clonidine, a chemical already used as an antihypertensive drug. The findings revealed that Ajmalicine binds to the same site on the target protein as Clonidine.

#### Article History:

Diterima : 5 November 2024

Direvisi : 9 Desember 2024

Diterbitkan : 19 Desember 2024

© 2024 Jurusan Biologi FST Universitas Pattimura

#### How to cite:

Taihuttu, M P J, Watung, FA dan Latief, YA. (2024). Bioaktif Alami dari Tapak Darah (*Catharanthus roseus*) Terhadap Penyakit Hipertensi dengan Pendekatan Dasar Penelitian *in silico*. Biofaal Journal. 5(2): 116-122

Copyright © 2024 Author(s)

Homepage: <https://ojs3.unpatti.ac.id/index.php/biofaal/index>

E-mail: [biofaaljournal@gmail.com](mailto:biofaaljournal@gmail.com)



This article is an open access article distributed under a [Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

## A. PENDAHULUAN

Hipertensi atau tekanan darah tinggi merupakan suatu kondisi dimana tekanan sistolik meningkat di atas normal, peningkatan tekanan darah sistolik lebih dari 140 mmHG dan tekanan darah diastolik lebih dari 90 mmHG. Hipertensi dapat dikelompokkan menjadi dua tipe berdasarkan penyebabnya, yaitu hipertensi primer dan sekunder. Hipertensi primer merupakan tipe hipertensi yang tidak diketahui penyebabnya dan terjadi di hampir 90 penderita. Hipertensi sekunder merupakan tipe hipertensi yang disebabkan oleh adanya komplikasi akibat penyakit lainnya, seperti gangguan fungsi ginjal, penyakit endokrin dan penyakit jantung (Taringan *et al.*, 2018). Hipertensi juga diketahui disebabkan oleh tingginya konsumsi garam (NaCl) dan dianggap sebagai faktor resiko independen untuk penyakit-penyakit vaskular seperti hipertrofi jantung dan kejadian *stroke* (Xie Y *et al.*, 2022). Asupan

garam yang tinggi dapat menyebabkan peningkatan konsentrasi  $\text{Na}^+$  ekstraseluler,  $\text{Cl}^-$  ekstraseluler, dan osmolaritas cairan ekstraseluler yang dapat memodulasi peningkatan tekanan darah (Alderman, 2007; Yunus, MH *et al.*, 2023).

Hipertensi merupakan faktor resiko utama yang juga dapat menyebabkan penyakit kardiovaskuler lanjutan seperti infark miokard, *stroke*, gagal ginjal dan gagal jantung (James *et al.*, 2014). Hipertensi saat ini telah menjadi masalah kesehatan dan penyebab kematian tertinggi secara global. WHO memperkirakan terdapat 9,4 juta orang meninggal setiap tahunnya akibat dari komplikasi hipertensi. Di negara maju ditemukan kasus hipertensi sebanyak 333 juta dari 972 juta penderita hipertensi dan 639 juta lainnya ditemukan di negara berkembang termasuk di negara Indonesia. Lebih dari satu miliar pasien di seluruh dunia menderita hipertensi, dan diperkirakan pada tahun 2025 jumlah ini akan meningkat hingga 1,56 miliar (Kearney, 2005; Pham, LT, 2024).

Pengobatan secara medis biasanya dilakukan untuk menurunkan tekanan darah yang tidak terkontrol lagi. Beberapa obat yang biasa digunakan dalam menurunkan tekanan darah antara lain, *spironolactone*, *propranolol*, *clonidin*, *prazosin*, *captopril*, *verapamil* dan *losartan* (Laurent, 2017). Namun, penggunaan obat-obat tersebut biasanya memiliki efek samping terutama berkaitan dengan kepatuhan penggunaannya oleh penderita. Efek samping konsumsi obat-obatan tersebut antara lain asma, disfungsi sistolik, *AV-Block*, *sick sinus syndrome*, glukosa intoleran, *hypoglycemia syndrome*, hiperglikemia, efek samping kondisi diuresis, dan lainnya (Laurent, 2017).

Senyawa alami berbasis fitokimia telah banyak digunakan sebagai alternatif pengobatan dan dianggap memiliki efek samping yang minim. WHO bahkan melaporkan bahwa sekitar 80% dari penduduk dunia menggunakan pengobatan tradisional dari ekstrak tanaman salah satunya Tanaman Tapak Dara (*Catharantus roseus* L). Pemanfaatan *Catharantus roseus* L digunakan untuk meredakan nyeri otot, obat depresi, obat sistem pusat, menghilangkan bengkak akibat sengatan tawon, obat mimisan, gusi berdarah, bisul dan sakit tenggorokan. Berbagai macam pemanfaatan tersebut disebabkan oleh metabolit sekunder yang dihasilkan tapak dara yaitu alkaloid, selain itu tapak dara digunakan untuk menghilangkan panas, bahan racun, menghentikan pendarahan, penenang dan yang paling sering untuk mengatasi Hipertensi. (Sadino *et al.*, 2023; Faisal & Prasetyawan, 2024).

*Catharantus roseus* L mengandung lebih dari 70 jenis alkaloid diantaranya ialah vinkristin dan vinblastin. *Catharantus roseus* L. mengandung lebih dari 100 jenis senyawa alkaloid yang salah satu diantaranya adalah Ajmalisin (Syam, N., Numba, 2024). Ajmalisin merupakan senyawa yang termasuk dalam kelompok monoterpen indol alkaloid. Senyawa ini dihasilkan oleh tanaman tapak dara (*Catharantus roseus*) yang berguna dalam pengobatan penyakit kardiovaskular dan antihipertensi. Kebutuhan akan senyawa tersebut terus meningkat setiap tahun. Oleh karena itu, senyawa ini potensial untuk diproduksi dalam jumlah banyak dan waktu yang singkat, karena diperlukan sekitar 3600 kg/tahun (Verpoorte *et al.*, 1991; Syam, N., Numba, 2024).

Penelitian ini bertujuan untuk menguji bioaktivitas senyawa ajmalisin dalam pengobatan hipertensi atau antihipertensi secara *in silico* menggunakan penambatan molekuler senyawa ligan dengan protein target yang potensial.

## B. METODE PENELITIAN

### Persiapan Ligan

Struktur kimia 3D dan SMILES ligan uji (Ajmalisin) berasal dari database senyawa pada server (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) dengan nomor ID: CID 441975.

### Seleksi Target

Dengan menggunakan bantuan beberapa *server* dilakukan Seleksi protein target untuk mengecek dan memastikan protein target yang dipilih tepat. Pertama memasukkan nilai SMILES ligan (Ajmalisin) pada *Pharm mapper* (<http://59.78.96.61/pharmmapper/>) untuk mengidentifikasi kandidat protein target yang potensial. Kedua melakukan pengecekan protein target yang potensial pada *server* kedua yaitu *Swiss Target Prediction* (<http://www.swisstargetprediction.ch/>) untuk mencocokkan protein target yang sama seperti yang ditemukan pada *server* pertama. Ketiga melakukan pengecekan protein target yang potensial pada *server* ketiga yaitu *SuperPret* (<http://prediction.charite.de/>) untuk mencocokkan protein target yang sama seperti yang ditemukan pada *server* pertama dan kedua. Agar tidak menimbulkan kegagalan dalam proses *docking*, Pada protein target dilakukan proses pengecekan secara berkali-kali untuk memastikan benar protein targetnya.

### Docking Molekul

Molecular *docking* molekul Ajmalisin, protein target, dan senyawa kontrol yang merupakan obat kimia dalam pengobatan darah tinggi (hipertensi) menggunakan *software* PyRx 0,8.

### Visualisasi dan Interaksi Molekul

Interaksi antara senyawa Ajmalisin, protein target dan senyawa kontrol yang diketahui berdasarkan visualisasi protein selanjutnya dianalisis dengan menggunakan *software* PyMol and LigPlus dan Discovery Studio 2016 Client.

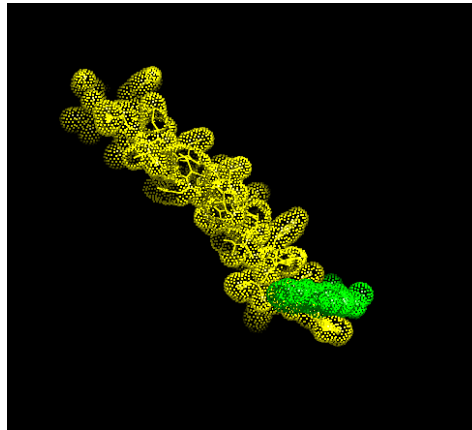
## C. HASIL DAN PEMBAHASAN

*In silico* merupakan metode penelitian yang menggunakan teknologi komputer dan *database* untuk penelitian pengembangan obat. Pengembangan senyawa melalui studi *in silico* merupakan informasi awal yang sangat bermanfaat. *In silico* dapat digunakan untuk mengetahui interaksi suatu senyawa dengan molekul target, diantaranya ialah reseptor. Interaksi antara senyawa dengan reseptor dapat divisualisasikan dengan metode komputasi serta dapat digunakan untuk mengetahui farmakofor dari suatu senyawa.

Dari hasil seleksi target menggunakan Pharmmapper (JOBID 17043231348), *Swiss Target Prediction* dan *SuperPret* ditemukan bahwa senyawa Ajmalisin berinteraksi dengan protein target *Alpha-2A adrenergic receptor*. Ajmalisin merupakan senyawa golongan alkaloid indol yang dihasilkan oleh tanaman dan dapat digunakan untuk mengatasi penyakit hipertensi. Ajmalisin dapat diisolasi terutama dari bagian akar tanaman tapak dara (*Catharanthus roseus*) (Syam, N., Numba, 2024).

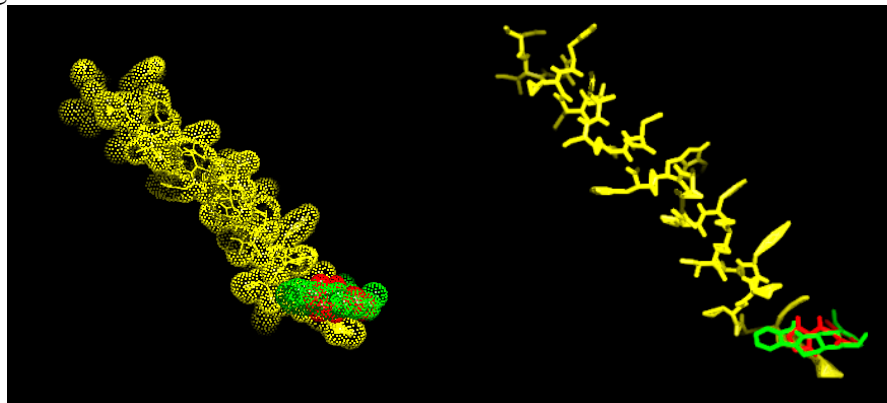
Sistem Saraf Simpatik (SNS) merupakan kontributor utama patogenesis dan pemeliharaan hipertensi. Peraturan kardiovaskular oleh sistem saraf simpatik dimediasi oleh aktivasi satu atau lebih dari sembilan sub tipe yang diketahui dari famili reseptor *adrenergic*, yaitu; Alpha (1A) -, alpha (1B) -, alpha (1D) -, alpha (2A) -, alpha (2B) -, alpha (2C) -, beta (1) -, beta (2) - dan beta 3) -ARs (adrenoseptor). Peran Reseptor alfa (2) -AR telah lama diketahui memiliki peran penting dalam mengatur pelepasan neurotransmitter dari saraf simpatis dan dari neuron adrenergik di sistem saraf pusat. Respon kompleks ini dimediasi oleh satu dari tiga sub tipe yang semuanya mempengaruhi tekanan darah dan aliran darah. Ketiga sub tipe tersebut hadir di otak, ginjal, jantung dan pembuluh darah. Namun, masing-masing berbeda mempengaruhi tekanan darah dan transmisi simpatis. Khususnya aktivasi alpha (2A) -AR pada hormon kontrol kardiovaskular noradrenalin (norepinephrine) (Baudier C, et al, 2023)

Berdasarkan hasil penelitian diketahui bahwa senyawa Ajmalisin mampu berikatan dengan protein *Alpha-2A adreneric receptor* dengan membentuk ikatan pada salah satu ujung sisinya. Hasil visualisasi dengan menggunakan *software PyMol and LigPlus* menunjukkan gambar sebagai berikut:



Gambar 1. Ikatan protein target dan senyawa alami Ajmalisin (Keterangan: Kuning = protein target; Hijau = senyawa Ajmalisin).

Ikatan yang terjadi antara protein target *Alpha-2A adreneric receptor* dan senyawa Ajmalisin ternyata diketahui memiliki situs posisi ikatan yang sama dengan senyawa kimia yang sudah umum digunakan sebagai obat hipertensi, yaitu Klonidin. Klonidin adalah obat yang dapat digunakan sendiri atau bersamaan dengan obat lain dengan fungsi untuk mengobati tekanan darah tinggi (hipertensi). Menurunkan tekanan darah tinggi, membantu mencegah stroke, serangan jantung, dan masalah ginjal. Klonidin termasuk ke dalam kelas obat A (agonis alpha pusat) yang bekerja pada otak untuk menurunkan tekanan darah. Ia menurunkan tekanan pembuluh darah sehingga darah dapat mengalir lebih mudah (Samiadi, 2017). Hasil visualisasi dengan menggunakan *software PyMol and LigPlus* menunjukkan gambar sebagai berikut:



Gambar 2. Ikatan protein target, senyawa alami Ajmalisin dan senyawa kimia Klonidin (Keterangan: Kuning = protein target; Hijau = senyawa Ajmalisin; warna; Merah = senyawa Klonidin).

Hasil tersebut menunjukkan senyawa alami Ajmalisin akan bekerja mirip dengan senyawa kimia yang digunakan sebagai obat anti hipertensi yaitu Klonidin. Hasil perhitungan kekuatan interaksi antara senyawa alami Ajmalisin dan protein target *Alpha-2A adreneric receptor* dibandingkan dengan senyawa kimiawi Klonidin dengan protein target *Alpha-2A adreneric receptor* menunjukkan hasil yang tidak berbeda nyata. Hal ini kembali menunjukkan potensi senyawa alami Ajmalisin dalam penggunaannya sebagai obat darah

tinggi atau anti hipertensi. Hasil yang diperoleh dari perhitungan kekuatan interaksi ikatan ligan dan protein target menggunakan *software PyRx 0,8* yang didapatkan sebagai berikut:

Tabel 1. Kekuatan interaksi senyawa Ajmalisin terhadap protein target *Alpha-2A adreneric receptor*

<i>Ligand</i>	<i>Binding Affinity</i>	<i>Rmsd/ub</i>	<i>Rmsd/lb</i>
<i>Ajmalisin-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-9,6	0	0
<i>Ajmalisin-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-9,1	7,7555	4,288
<i>Ajmalisin-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-9	7,792	3,634
<i>Ajmalisin-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,7	8,579	6,26
<i>Ajmalisin-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,7	4,476	3,201
<i>Ajmalisin-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,4	8,007	3,334
<i>Ajmalisin-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,2	4,618	3,764
<i>Ajmalisin-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,2	4,571	2,871
<i>Ajmalisin-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8	3,598	2,326

Tabel 2. Kekuatan interaksi senyawa Klonidin terhadap protein target *Alpha-2A adreneric receptor*

<i>Ligand</i>	<i>Binding Affinity</i>	<i>Rmsd/ub</i>	<i>Rmsd/lb</i>
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-7,6	0	0
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-7,6	2,437	0,114
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-7,4	4,108	2,982
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-7,4	4,42	2,888
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-7,4	5,708	4,079
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-7,4	5,419	4,068
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-7,1	5,393	3,739
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-7	5,271	3,775
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-6,8	5,182	3,143
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-9,8	0	0
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-9	7,782	3,595
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,8	8,062	4,038
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,8	2,04	1,61
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,7	7,863	3,26
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,7	4,955	4,025
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,6	7,859	3,861
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,6	4,441	3,039
<i>Clonidine-Alpha-2A adreneric receptor</i>	-8,5	4,511	3,168

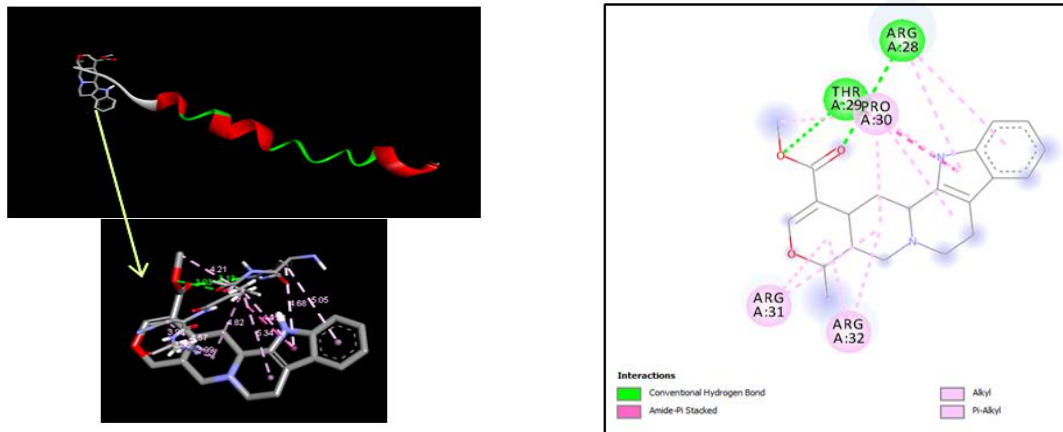
Diketahui dari Tabel 1 dan Tabel 2 nilai *Binding Affinity* senyawa Ajmalisin yaitu nilai terendah sampai tertingginya, serta nilai *Binding Affinity* pada senyawa kontrol yaitu Klonidin yang lebih beragam memiliki kedekatan nilai diantara keduanya. *Binding Affinity* menunjukkan kekuatan ikatan ligan dengan protein targetnya dimana nilai yang semakin negatif menunjukkan ligan tersebut lebih mudah berikatan dengan protein targetnya karena membutuhkan energi yang lebih sedikit untuk berikatan. Rentang nilai *Binding Affinity* yang diperoleh menunjukkan seberapa banyak sisi ligan yang berikatan dengan protein targetnya. Berdasarkan hasil perhitungan kekuatan ikatan dengan menggunakan *software PyRx 0,8* diketahui senyawa kontrol yaitu Klonidin lebih banyak memiliki rentang ikatan dan dengan nilai kekuatan ikatan yang lebih rendah dari pada senyawa Ajmalisin.

Visualisasi ikatan antar molekul menggunakan *software Discovery Studio 2016 Client* menunjukkan jarak ikatan antar molekul serta jenis ikatan yang terjadi pada setiap sisi molekul ligan dan protein targetnya. Hasil penelitian *In Silico* menggunakan aplikasi *Discovery Studio 2016 Client* adalah sebagai berikut:

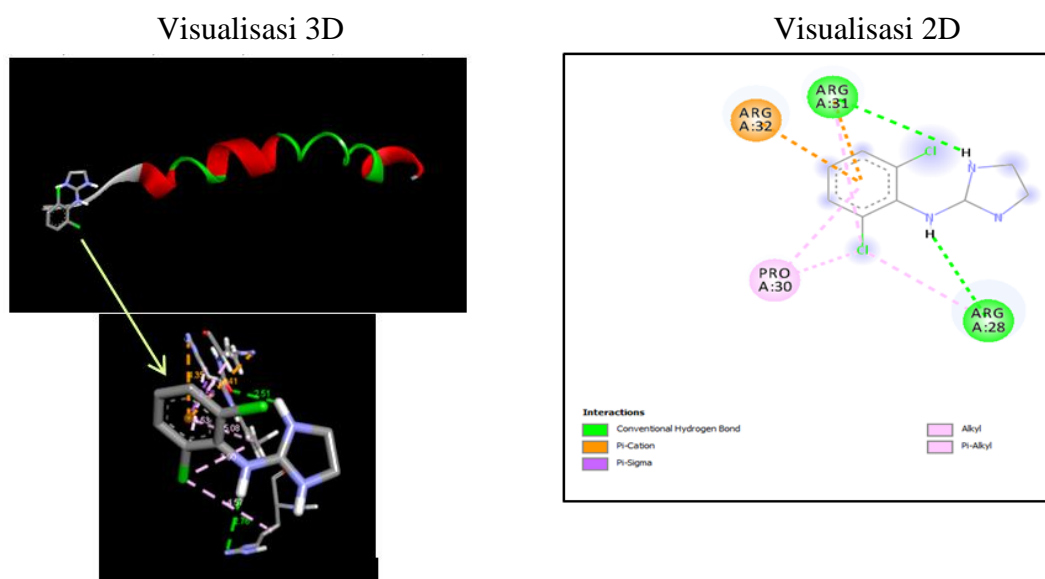
Visualisasi 3D

Visualisasi 2D





Gambar 3. Interaksi senyawa Ajmalisin dan protein target *Alpha-2A adrenergic receptor*



Gambar 4. Jarak ikatan antar Klonidin dan protein target serta macam ikatan yang terjadi

Berdasarkan Gambar 3 diketahui bahwa jarak ikatan antara senyawa Ajmalisin dan protein target bervariasi, mulai dari 3,03 sampai 5,34 *Amstrong* dengan macam interaksi kimia yang terjadi yaitu ikatan *hydrogen*, Alkil, Pi-Alkil dan tumpukan Amide-Pi. Sedangkan berdasarkan Gambar 4 diketahui bahwa jarak ikatan senyawa Klonidin dan protein targetnya juga bervariasi, yaitu dimulai dari 2,51 sampai 5,08 *Amstrong* dengan macam interaksi kimia yang terjadi yaitu ikatan *hydrogen*, Pi-Cation, Pi-Sigma, Alkil dan Pi-Alkil. Hasil visualisasi tersebut menunjukkan senyawa Ajmalisin mungkin tidak sebaik senyawa kontrolnya yaitu Klonidin, namun pemanfaatan senyawa alami dalam pengobatan hipertensi memiliki kelebihan tersendiri dibandingkan dengan senyawa kimia, diantaranya lebih aman digunakan

#### D. KESIMPULAN

Penelitian ini membuktikan bahwa senyawa alami Ajmalisin yang bisa diperoleh dari tanaman tapak dara (*Catharanthus roseus*) memiliki potensi sebagai obat darah tinggi atau anti hipertensi yang memiliki kemiripan dengan senyawa kimia yang biasa digunakan sebagai

obat yaitu *Klonidin*, berdasarkan posisi situs ikatan antar molekul yang sama dan nilai *Binding Affinity* antar molekul.

## E. DAFTAR PUSTAKA

- Baudier, C., Fougerousse, F., Asselbergs, F. W., Guedj, M., Komajda, M., Kotecha, D., ... & Tyl, B. (2023). Unraveling the relationships between alpha-and beta-adrenergic modulation and the risk of heart failure. *Frontiers in cardiovascular medicine*, *10*, 1148931. doi: 10.3389/fcvm.2023.1148931
- James, P. A., Oparil, S., Carter, B. L., Cushman, W. C., Dennison-Himmelfarb, C., Handler, J., ... & Ortiz, E. (2014). 2014 evidence-based guideline for the management of high blood pressure in adults: report from the panel members appointed to the Eighth Joint National Committee (JNC 8). *Jama*, *311*(5), 507-520. doi:10.1001/jama.2013.284427
- Laurent, S. (2017). Antihypertensive drugs. *Pharmacological research*, *124*, 116-125. <https://doi.org/10.1016/j.phrs.2017.07.02>.
- Musliikh, F. A., & Prasetyawan, F. (2024). Potensi Efek Samping dan Toksisitas Senyawa Vincristine dari Tapak Dara (*Catharanthus roseus* L.). *Jurnal Informatika dan Kesehatan*, *1*(1), 1-5.
- Pham, L. T., Chu, S. D., & Hoang, H. V. (2024). Characteristic of 24-Hour Blood Pressure Dipping Patterns in Hypertensive Stroke Patients. *Vascular Health and Risk Management*, 501-509. DOI: [10.2147/VHRM.S490052](https://doi.org/10.2147/VHRM.S490052)
- Rao, X., Asico, L. D., Zanos, P., Mahabeleshwar, G. H., Singh Gangwar, R., Xia, C., ... & Rajagopalan, S. (2019). Alpha2B-adrenergic receptor overexpression in the brain potentiates air pollution-induced behavior and blood pressure changes. *Toxicological Sciences*, *169*(1), 95-107. [10.1093/toxsci/kfz025](https://doi.org/10.1093/toxsci/kfz025)
- Syam, N., Numba, S., & Imaniar, M. (2024). Increasing Flavonoid Compounds Through The Use Of Elicitors In Callus Culture *Catharanthus Roseus* L. *Jurnal Penelitian Pertanian Terapan*, *24*(3), 366-374.
- Sadino, A., Barung, E. N., Makaluwu, R. S., & Kalonio, D. E. (2023, June). Evaluasi Pemanfaatan Tumbuhan Untuk Pengobatan Hipertensi Pada Ibu Rumah Tangga Di Kelurahan Santiago Kecamatan Tahuna, Kabupaten Kepulauan Sangihe. In *PROSIDING SEMINAR NASIONAL* (Vol. 1, pp. 333-342).
- Samiadi, L. A. (2017). *Klonidin*. <https://helohehat.com/obat/klonidin/>. Diakses tanggal 09 Mei 2017.
- Tarigan, A. R., Lubis, Z., & Syarifah, S. (2018). Pengaruh pengetahuan, sikap dan dukungan keluarga terhadap diet hipertensi di desa Hulu Kecamatan Pancur Batu tahun 2016. *Jurnal kesehatan*, *11*(1), 9-17.
- Xie, Y., Qi, H., Peng, W., Li, B., Wen, F., Zhang, F., & Zhang, L. (2022). Higher potassium intake and lower sodium intake may help in reducing CVD risk by lowering salt sensitivity of blood pressure in the Han Chinese population. *Nutrients*, *14*(20), 4436.
- Yunus, M. H., Kadir, S., & Lalu, N. A. S. (2023). The Relationship Between Salt Consumption Patterns and the Incidence of Hypertension in the Elderly At the Kota Tengah Health Center. *Journal Health & Science: Gorontalo Journal Health and Science Community*, *7*(1), 163-171.