

ABSTRAK

ALZA AHDIYA FATAKHSYA. 2023. **Analisis *Molecular docking* dan Prediksi Toksisitas Kopi Robusta (*Coffea canephora*) secara *In Silico* sebagai Antihipertensi untuk Suplemen Bahan Ajar Biologi.** Jurusan Pendidikan Biologi. Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan. Universitas Siliwangi, Tasikmalaya.

Perkembangan kedai kopi yang ekspansif dengan harga terjangkau membuat kopi dicap pemicu hipertensi. Namun, kehadiran asam klorogenat dalam kopi sebagai polifenol utama justru merupakan faktor proteksi hipertensi. Kopi robusta mempunyai kandungan asam klorogenat yang lebih melimpah dengan harga yang lebih ekonomis sehingga keberadaan kandungan asam klorogenat pada kopi robusta sebagai antihipertensi perlu divalidasi dengan *molecular docking* dan prediksi toksisitas. Penelitian ini dilakukan dengan tujuan untuk menganalisis hasil *molecular docking* dan prediksi toksisitas kopi robusta (*Coffea canephora*) sebagai antihipertensi secara *in silico*. Metode penelitian yang dipakai berupa deskriptif kualitatif secara *in silico* dengan teknik yang digunakan meliputi *molecular docking* dan prediksi toksisitas antara ligan berupa asam klorogenat dengan reseptor berupa beta adrenergik dan *Angiotensin Converting Enzyme* (ACE). *Software*, *webserver*, dan *database* yang digunakan meliputi *Protein Data Bank* (PDB), PubChem, Biovia Discovery Studio 2021, pkCSM, PASS *online*, AutoDock Tools 1.5.7, AutoDock Vina, dan Protox II. Berdasarkan hasil *molecular docking* menunjukkan konformasi terbaik dengan nilai energi afinitas dengan reseptor beta adrenergik -8.9 kkal/mol dan dengan *Angiotensin Converting Enzyme* (ACE) menghasilkan nilai -10.1 kkal/mol. Asam klorogenat memenuhi *Lipinski's Rule of Five* dan memiliki profil farmakokinetik yang mencakup absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas yang dinilai baik dengan kelas toksisitas V (lima) yang mengindikasikan toksisitas rendah. Dari serangkaian penelitian ini maka dapat disimpulkan bahwa secara *in silico* kopi robusta berpotensi sebagai antihipertensi.

Kata kunci : Kopi Robusta, Asam Klorogenat, *In Silico*, Reseptor Beta Adrenergik, *Angiotensin Converting Enzyme* (ACE)

ABSTRACT

ALZA AHDIYA FATAKHSYA. 2023. ***Molecular docking Analysis and Toxicity Prediction of Robusta Coffee (Coffea canephora) in Silico as Antihypertensive for Biology Teaching Material Supplement***. Department of Biology Education. Faculty of Teacher Training and Education. Siliwangi University, Tasikmalaya.

The expansive development of coffee shops with affordable prices has made coffee a trigger for hypertension. However, the presence of chlorogenic acid in coffee as the main polyphenol is actually a protective factor for hypertension. Robusta coffee has a more abundant chlorogenic acid content at a more economical price, so the presence of chlorogenic acid content in robusta coffee as an antihypertensive needs to be validated by molecular docking and toxicity prediction. This study was conducted with the aim of analyzing the results of molecular docking and toxicity prediction of robusta coffee (Coffea canephora) as antihypertensive in silico. The research method used is descriptive-qualitative in silico, with the techniques used include molecular docking and prediction of toxicity between ligands in the form of chlorogenic acid with receptors in the form of beta-adrenergic and Angiotensin Converting Enzyme (ACE). The software, webserver, and database used include Protein Data Bank (PDB), PubChem, Biovia Discovery Studio 2021, pkCSM, PASS online, AutoDock Tools 1.5.7, AutoDock Vina, and Prottox II. Based on the molecular docking results, the best conformation with an affinity energy value with beta adrenergic receptors of -8.9 kcal/mol and with Angiotensin Converting Enzyme (ACE) resulted in a value of -10.1 kcal/mol. Chlorogenic acid fulfills Lipinski's Rule of Five and has a pharmacokinetic profile that includes absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity that is considered good with toxicity class V (five) which indicates low toxicity. From this series of studies, it can be concluded that robusta in silico has the potential to be an antihypertensive.

Keywords: Robusta Coffee, Chlorogenic Acid, In Silico, Beta Adrenergic Receptor, Angiotensin Converting Enzyme (ACE).