

ABSTRAK

MELINDA RAHMAT. 2024. **POTENSI SENYAWA BIOAKTIF GULA AREN (*Arenga pinnata*) SEBAGAI ANTIHIPERTENSI MELALUI TEKNIK MOLECULAR DOCKING SECARA *IN SILICO* UNTUK SUPLEMEN BAHAN AJAR BIOLOGI.** Jurusan Pendidikan Biologi, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Siliwangi, Tasikmalaya.

Hipertensi merupakan salah satu penyebab utama kematian dini secara global, yang sebagian besar berhubungan dengan gangguan pada sistem *renin-angiotensin-aldosteron* (RAAS). Pada sistem RAAS, *Angiotensin Converting Enzyme* (ACE) berperan dalam mengubah angiotensin I menjadi angiotensin II, yang menyebabkan peningkatan tekanan darah. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi senyawa bioaktif dalam gula aren (*Arenga pinnata*) sebagai inhibitor ACE melalui pendekatan *in silico*. Metode penelitian yang digunakan adalah deskriptif kualitatif secara *in silico*. Analisis GC-MS (*Gas Chromatography-Mass Spectrometry*) dilakukan untuk mengidentifikasi senyawa bioaktif dalam gula aren. Penelitian ini dilakukan dengan teknik *molecular docking* untuk memprediksi afinitas dan stabilitas interaksi senyawa dengan ACE. Proses *docking* melibatkan tahapan persiapan struktur protein dan ligan, validasi metode *docking*, serta analisis hasil interaksi. Prediksi fisikokimia, farmakokinetik dan toksisitas senyawa juga dilakukan menggunakan perangkat *lunak SwissADME* dan *Protox-II* untuk menilai kelayakan senyawa sebagai kandidat obat antihipertensi. Hasil analisis GC-MS mengidentifikasi 22 senyawa dalam gula aren, 8 diantaranya berpotensi sebagai antihipertensi, yaitu 9,10-Secocholesta-5,7,10(19)-triene, 10-Octadecenoic acid, methyl ester, Desulphosinigrin, d-Glycero-d-ido-heptose, d-Mannose, 16-Octadecenoic acid, 11-Octadecenoic acid, dan Dodecanoic acid, 2,3-bis (acetyloxy)propyl ester. Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa 9,10-Secocholesta-5,7,10(19)-triene memiliki nilai *binding affinity* terbaik, yaitu -8,9 kkal/mol, yang lebih baik dibandingkan dengan captopril sebagai ligan kontrol dengan skor -5,9 kkal/mol. Semua senyawa yang diuji memenuhi aturan *Lipinski's rule of five*, yang mendukung penyerapan dan penetrasi membran biologis. Analisis farmakokinetik menunjukkan bahwa semua senyawa uji memiliki profil farmakokinetik yang mendukung sebagai kandidat antihipertensi. Profil toksisitas menunjukkan beberapa senyawa, terutama d-Glycero-d-ido-heptose dan d-Mannose, menunjukkan toksisitas level 6. Sehingga secara keseluruhan senyawa ini memiliki potensial sebagai kandidat obat antihipertensi yang aman.

Kata kunci: Gula aren, senyawa bioaktif, antihipertensi, *molecular docking*, *in silico*, *Angiotensin-Converting Enzyme* (ACE)