

ABSTRAK

Arumah Syarifatus Saniyah. 24020221130022. **Studi *In Silico* Senyawa Fitokimia Tumbuhan Remason (*Polygala* sp.) sebagai Agen Imunomodulator.** Di bawah bimbingan Hermin Pancasakti Kusumaningrum dan Siti Roswiyah Yulyani.

Autoimun adalah respons imun abnormal yang menyerang jaringan sehat. Di Indonesia, penyakit ini menyerang lebih dari 2,5 juta orang dan pada tahun 2021 menyebabkan lebih dari 35.000 kasus kematian. Pemberian terapi obat imunomodulator non-steroidal sintesis bersifat toksik terhadap hati dan ginjal. Senyawa fitokimia pada *Polygala* sp. memiliki aktivitas antiinflamasi dan berpotensi menghambat aktivitas TNF- α dan interleukin-6 (IL-6) yang berperan dalam patogenesis autoimun. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis dan membandingkan senyawa fitokimia pada beberapa spesies *Polygala* yang berpotensi sebagai agen imunomodulator dan menghambat aktivitas TNF- α dan IL-6 melalui studi *in silico molecular docking*. Metode yang dilakukan meliputi pengumpulan data GC-MS dari *Polygala vulgaris*, *P. rosmarinifolia*, dan *P. javana* melalui kajian literatur, preparasi reseptor dan ligan uji, penentuan sisi aktif protein reseptor, *docking* ligan uji, visualisasi hasil *docking*, dan uji farmakologi Lipinski, serta analisis data. Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa *binding affinity* ligan kontrol terhadap TNF- α yaitu -9,4 kcal/mol, sedangkan terhadap IL-6 yaitu -6,5 kcal/mol. Pada *P. vulgaris*, senyawa N-isobutyl-dodecatetraenamide memiliki *binding affinity* terkuat terhadap TNF- α dan IL-6 yaitu masing-masing sebesar -6,2 kcal/mol dan -5,5 kcal/mol. Pada *P. rosmarinifolia* senyawa dengan *binding affinity* terkuat yaitu benzene, 1,2-dimethoxy-4-[[4-methylphenyl)sulfonyl]methyl]- dengan nilai *binding affinity* sebesar -7,4 kcal/mol terhadap TNF- α dan -6,4 kcal/mol terhadap IL-6. Sementara *P. javana* memiliki senyawa spiro[androst-5-ene-17,1'-cyclobutan]-2'-one, 3-hydroxy-, (3 β ,17 β) dengan nilai *binding affinity* sebesar -9,5 kcal/mol terhadap TNF- α ; senyawa 1H-perimidine, 2,3-dihydro-2-(2,4,5-trimethoxyphenyl)- dan 4H-1-Benzopyran-4-one, 5-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-3,7-dimethoxy- dengan nilai *binding affinity* -7,1 dan -7,0 kcal/mol terhadap IL-6. Senyawa-senyawa dari ketiga spesies tersebut memenuhi uji farmakologi 5 aturan Lipinski.

Kata kunci: *Polygala* sp., TNF- α , IL-6, autoimun, *molecular docking*