

ABSTRAK

SANIA NUR FADZILLAH, 2023. **Analisis *In Silico* : Aktivitas Antiinflamasi Dan Prediksi Toksisitas Senyawa Metabolit Sekunder *Physalis peruviana L.* Sebagai Sumber Belajar Biologi.** Jurusan Pendidikan Biologi, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Siliwangi, Tasikmalaya.

Pola kehidupan kembali ke alam “*back to nature*” termasuk dalam bidang obat-obatan membentuk suatu kebiasaan terhadap penggunaan tumbuhan sebagai obat tradisional. Seperti halnya dengan daun ciplukan (*Physalis peruviana L.*) oleh masyarakat Desa Wanasuka Kecamatan Pangalengan Kabupaten Bandung dipergunakan sebagai obat tradisional pada penyakit peradangan seperti rematik, asma, dan maag dikarenakan efek samping dan toksisitas yang dihasilkan relatif kecil jika dibandingkan dengan obat modern. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui potensi senyawa metabolit sekunder yang terdapat pada daun ciplukan (*Physalis peruviana L.*) sebagai kandidat obat antiinflamasi. Metode penelitian ini adalah metode *molecular docking* dengan melalui pengujian sifat fisikokimia, profil farmakokinetika dari senyawa uji melalui situs Pre-ADMET (Absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas) dan *Lipinski Rule of Five*. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa afinitas pengikatan hanya senyawa *Caffeic acid* dengan reseptor PTGS2 (PDB ID: 5F19) menunjukkan hasil yang lebih negatif dibandingkan dengan obat pembanding yaitu *Aspirin* dan *Ibuprofen* yakni -7.4. Adanya interaksi molekuler yang mirip dengan *Aspirin* yakni penambahan residu asam amino dari ASN 382 dan TYR 385 menghasilkan inhibisi kuat ireversibel terhadap PTGS2 (PDB ID: 5F19) dan diprediksi mampu menghambat *prostaglandin H synthase* dan menunjukkan bahwa *Caffeic acid* mampu menghasilkan inaktivasi PTGS2 (PDB ID: 5F19) ireversibel. Sehingga berpotensi sebagai kandidat obat antiinflamasi yang lebih aman bagi tubuh dikarenakan memiliki potensi yang hampir sama atau mendekati dengan mekanisme kerja *Aspirin* terhadap penyakit peradangan.

Kata Kunci: Antiinflamasi, *In Silico*, *Physalis peruviana L.*, Prediksi Kandidat Obat