

## ABSTRAK

### **PENAMBATAN MOLEKUL DAN DINAMIKA MOLEKUL SENYAWA AKTIF DARI BUAH ANGGUR (*Vitis vinifera* L.) TERHADAP *TOLL-LIKE RECEPTOR 2* SEBAGAI IMUNOMODULATOR**

Oleh:

**Aldi Ahmad Sobari**

**11181150**

Imunomodulator merupakan obat yang dapat memperbaiki sistem imun yang fungsinya terganggu. Obat-obatan imunomodulator dari bahan sintetis seperti isoprinosin, levamisol, sitoksan dan azatioprin umumnya dapat menyebabkan efek samping seperti gangguan pencernaan, penurunan kadar trombosit, dan urtikaria. Sehingga tidak dapat dikonsumsi setiap hari. Penggunaan bahan alam diharapkan menjadi alternatif yang mampu mengurangi efek samping imunomodulator pada penggunaannya. Berdasarkan penelitian, beberapa tanaman diduga memiliki khasiat sebagai imunomodulator salah satunya yaitu anggur (*Vitis vinifera* L.). Anggur memiliki senyawa-senyawa aktif seperti polifenol, flavonoid, anthosianin dan resveratrol yang memiliki khasiat sebagai antioksidan yang mampu memperkuat sistem daya tahan tubuh manusia. Tujuan penelitian ini yaitu untuk melihat afinitas dan stabilitas interaksi dari senyawa uji dan senyawa pembanding terhadap *Toll-like receptor 2* sebagai imunomodulator. Metodologi penelitian yang digunakan yaitu metode simulasi penambatan molekul menggunakan AutoDock 4.2, dan dilanjutkan dengan metode simulasi dinamika molekul menggunakan AMBER 18. Hasil pengujian penambatan molekul 17 senyawa uji diperoleh 5 senyawa uji (L6, L8, L13, L14, dan L15) yang berpotensi sebagai imunomodulator berdasarkan nilai energi bebas Gibbs dan konstanta inhibisi. 2 senyawa uji yang memiliki nilai terendah dan mendekati senyawa pembanding digunakan untuk dilanjutkan ke tahap MD. Hasil simulasi dinamika molekul senyawa dengan kode L14 dan L15 dengan nilai energi bebas ikatan MMGBSA secara berturut-turut -66,3305 kkal/mol dan -58,2805 kkal/mol memiliki nilai energi bebas ikatan yang lebih baik daripada ligan pembanding dengan nilai energi bebas ikatan -37,8409 kkal/mol. Disimpulkan bahwa senyawa dengan kode ligan L14 (*Proanthocyanidin*) dan L15 (*Procyanidin*) berpotensi sebagai senyawa yang memiliki afinitas dan stabilitas interaksi terhadap *Toll-like receptor2*.

Kata Kunci : Dinamika Molekul, Imunomodulator, Penambatan Molekul, TLR2, *Vitis vinifera* L.

**ABSTRACT****DOCKING AND MOLECULES DYNAMIC ACTIVE COMPOUND OF  
GRAPES (*Vitis vinifera* L) AT TOLL-LIKE RECEPTOR 2 AS  
IMMUNOMODULATOR****By:****Aldi Ahmad Sobari****11181150**

Immunomodulators are drugs that can improve the immune system whose function is impaired. Immunomodulatory drugs from synthetic materials such as isoprinosine, levamisole, cytokines, and azathioprine generally can cause side effects such as digestive disorders, decreased platelet levels, and urticaria. So it can not be consumed every day. The use of natural ingredients is expected to be an alternative that can reduce the side effects of immunomodulators in its use. Based on research, some plants are thought to have efficacy as immunomodulators, one of which is grape (*Vitis vinifera* L.). Grapes have active compounds such as polyphenols, flavonoids, anthocyanins, and resveratrol which have antioxidant properties that can strengthen the human immune system. The purpose of this study was to examine the affinity and stability of the interaction of the test compound and comparison compound against Toll-like receptor 2 as an immunomodulator. The research methodology used is the molecular docking simulation method using AutoDock 4.2, and continued with the molecular dynamics simulation method using AMBER 18. The results of the molecular anchoring test of 17 test compounds obtained 5 test compounds (L6, L8, L13, L14, and L15) which have potential as immunomodulators based on Gibbs free energy values and the inhibition constant. The 2 test compounds that have the lowest values and are close to the comparison compounds are used to proceed to the MD stage. The results of the molecular dynamics simulation of compounds with codes L14 and L15 with a bond free energy value of MMGBSA -66.3305 kcal/mol and -58.2805 kcal/mol, respectively, have a bond free energy value that is better than the comparison ligand with a free energy value bond -37.8409 kcal/mol. It was concluded that compounds with ligand codes L14 (Proanthocyanidin) and L15 (Procyanidin) have potential as compounds that have affinity and stability of interaction with Toll-like receptor2.

**Keywords:** Molecular Dynamics, Immunomodulator, Moleculer Docking, TLR2, *Vitis vinifera* L.