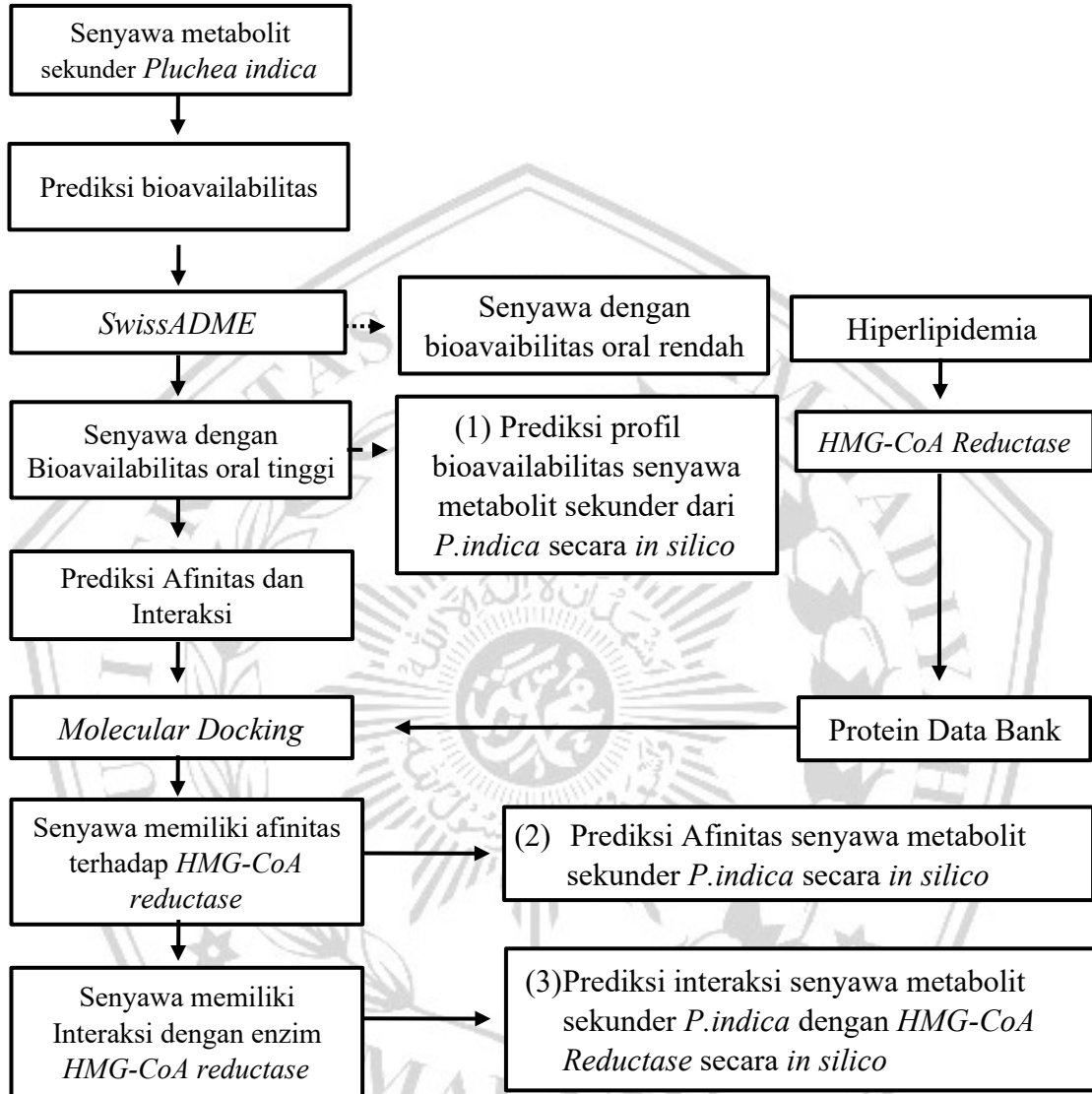


BAB 3
KERANGKA KONSEP

3.1. Kerangka Konseptual Penelitian



Keterangan:

- > : Menandakan proses dilanjutkan ke tahap selanjutnya (inklusi)
-> : Menandakan proses tidak dilanjutkan ke tahap selanjutnya (eksklusi)

3.2. Deskripsi Bagan

Secara empiris, beluntas (*Pluchea indica*) dapat dimanfaatkan sebagai obat tradisional pada kondisi tubuh yang mengalami abnormalitas kadar profil lipid atau lipoprotein. Kondisi tersebut juga disebut dengan hiperlipidemia atau dislipidemia.

Dalam mencari obat biologis, pengujian yang berguna adalah menganalisis data yang dipublikasikan tentang molekul senyawa aktif biologis yang ada dalam tanaman. Pengujian komputasi secara *in silico* menawarkan alat yang bermanfaat untuk menemukan senyawa target yang menghambat proses penyakit, membantu dalam memahami mekanisme aksi dari senyawa target (Mohammed, *et al* 2022). Uji pendahuluan dengan *in silico* dilakukan dengan model prediksi senyawa uji melalui simulasi komputasi. Uji *in silico* digunakan untuk *screening* senyawa uji dalam jumlah banyak sebelum digunakan untuk pengujian secara *in vivo* dan *in vitro*. Hal tersebut juga membantu dalam menghemat waktu dan sumberdaya dalam proses penelitian. Selain itu juga untuk menguji toksisitas dari senyawa, serta untuk menguji senyawa uji yang tidak memungkinkan untuk diuji secara langsung secara *in vivo* dan *in vitro* (Ekins, *et al.*, 2007).

Pada tahap awal, dilakukan *screening* dari senyawa metabolit sekunder yang memiliki bioavailabilitas oral yang baik karena mampu mencapai sirkulasi sistemik dan nilai ketersediaan hayati (f) mendekati 1. Prediksi senyawa metabolit sekunder yang memiliki bioavailabilitas oral dilakukan menggunakan *Web SwissADME* dengan metode *BOILED-Egg* untuk memprediksi secara bersamaan parameter kunci ADME, yaitu penyerapan pasif saluran pencernaan dan pembuluh darah penyaring dari sistemik ke otak yang secara konseptual bergantung pada dua deskriptor fisikokimia, WLOGP untuk lipofilisitas dan tPSA untuk polaritas (Daina, *et al.*, 2016). Senyawa yang masuk dalam prediksi bioavailabilitas oral adalah senyawa yang hanya berada pada lingkaran *BOILED-Egg* putih/*human intestine absorbtions* (HIA) pada metode *BOILED-Egg* yang mengartikan bahwa senyawa tersebut mempunyai nilai absobsi yang tinggi.

File senyawa enzim HMG-CoA Reductase untuk *Molecular docking* diambil dari web server *Protein Data Bank* yang kemudian dipreparasi dengan MMFF94s karena terdapat nitrogen. Tahapan Selanjutnya dilakukan prediksi

afinitas senyawa metabolit sekunder dengan *Molecular Docking* dengan menggunakan *Autodock*. Program *docking* ini efektif dan cepat untuk mengevaluasi senyawa metabolit sekunder yang besar dan menyaring senyawa menjadi lebih sedikit (Vieira, *et al.*, 2019). Dari metode *Molecular docking* dapat dilihat hasil prediksi afinitas dan interaksi yang terjadi antara protein target dan senyawa metabolit sehingga mampu menjawab rumusan masalah kedua dan ketiga. Interaksi senyawa metabolit sekunder diprediksi dengan *Protein Plus*. Luaran dari penelitian ini adalah dapat menjadi salah satu sumber informasi terkait senyawa metabolit sekunder pada *P. indica* yang mempunyai aktivitas biologis sebagai inhibitor terhadap enzim *HMG-CoA reductase* sehingga dapat dimanfaatkan sebagai antihiperlipidemia.

