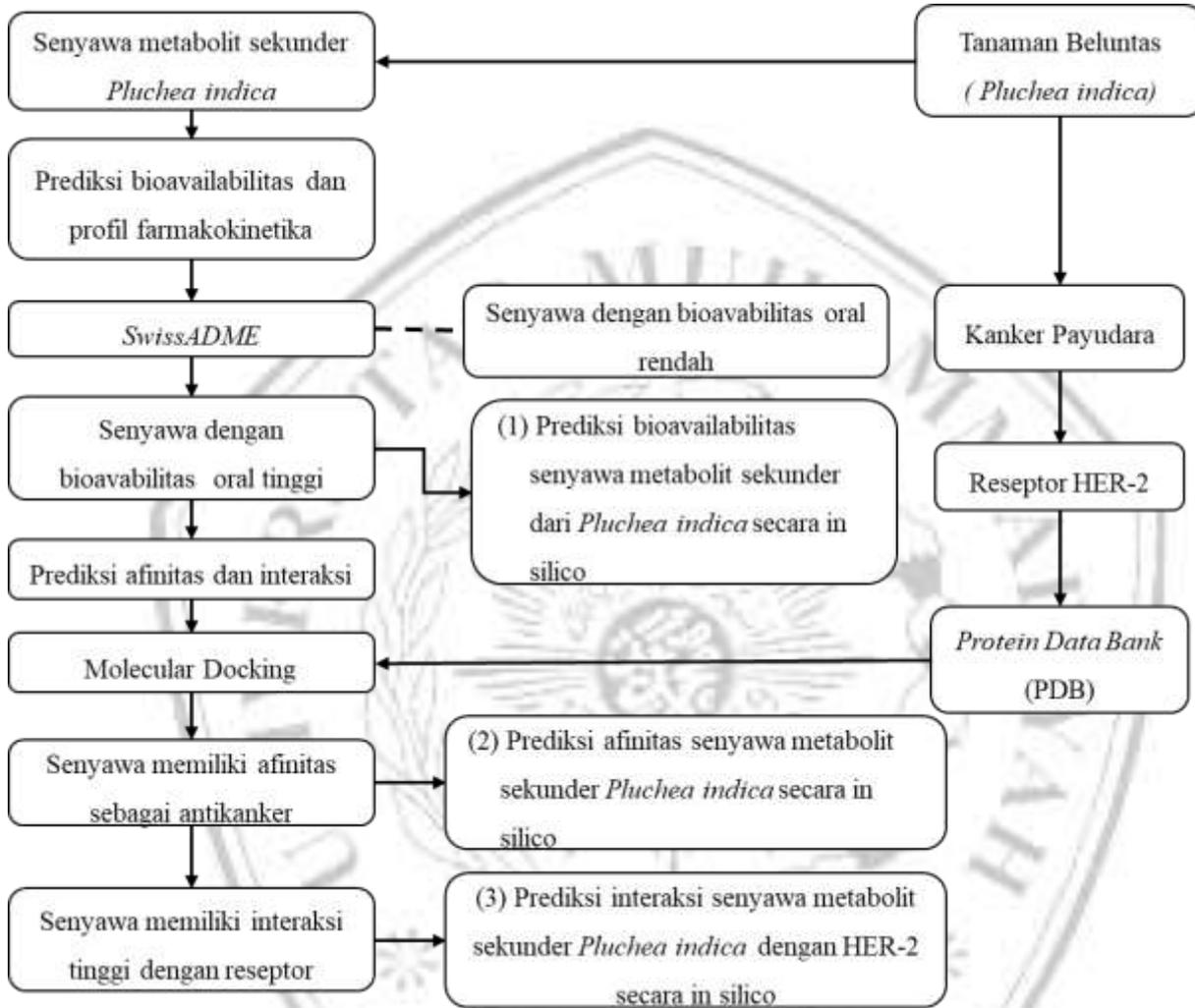


BAB 3
KERANGKA KONSEPTUAL

3.1 Kerangka Konseptual Penelitian



Gambar 3.1 Kerangka Konseptual Penelitian

Keterangan:
 — : Proses dilanjutkan ke tahap selanjutnya
 - - - : Proses tidak dilanjutkan ke tahap selanjutnya (Eksklusi)

3.2 Kerangka Konseptual

Tanaman beluntas (*Pluchea indica*) diketahui dapat menghambat perkembangan dan mekanisme apoptosis pada sel kanker (Asri, 2016). Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui potensi metabolit sekunder dari *P. indica* sebagai calon obat antikanker dengan menggunakan analisis *in silico*. Senyawa metabolit sekunder dari *P. indica* diperoleh dari *database* atau jurnal penelitian.

Uji *in silico* digunakan sebagai uji pendahuluan dengan memprediksi eksperimen biologis menggunakan bantuan komputer. Uji ini dimaksudkan untuk menyeleksi senyawa uji dalam jumlah banyak sebelum dilakukan uji klinis (Jean-Quartier et al., 2018). Untuk seleksi awal, dilakukan dengan melakukan prediksi bioavailabilitas senyawa metabolit sekunder *P. indica* dengan menggunakan SwissADME dan metode Boiled-Egg. Metode ini menggunakan parameter lipofilitas dan polaritas dari senyawa metabolit sekunder untuk mendapatkan senyawa dengan bioavailabilitas yang baik. (Daina & Zoete, 2016). Dari prediksi ini nantinya dapat menyeleksi senyawa metabolit sekunder yang memiliki potensi sebagai obat peroral.

Untuk mengetahui prediksi afinitas dan interaksi, dilakukan *Molecular Docking* dengan menggunakan aplikasi *Autodock PyRx*. Metode ini dapat memprediksi afinitas dan interaksi antara senyawa dengan protein target yang di dapat dari *Protein Data Bank* (PDB) (Pratama et al., 2017). Dari hasil *docking* didapatkan data prediksi nilai energi ikat atau *binding energy* (ΔG) dan konstanta inhibisisi (K_i). Semakin rendah nilai G dan K_i maka proses pengikatan membutuhkan energi yang lebih rendah dan menunjukkan suatu senyawa memiliki interaksi yang kuat (Sagitasa dkk, 2021).

Selanjutnya dilakukan visualisasi hasil *docking* dengan menggunakan *Proteins.Plus* untuk melihat bagaimana interaksi metabolit sekunder *P. Indica* dengan protein target, sehingga nantinya akan diperoleh luaran berupa senyawa yang memiliki afinitas dan interaksi yang baik dengan reseptor HER-2.