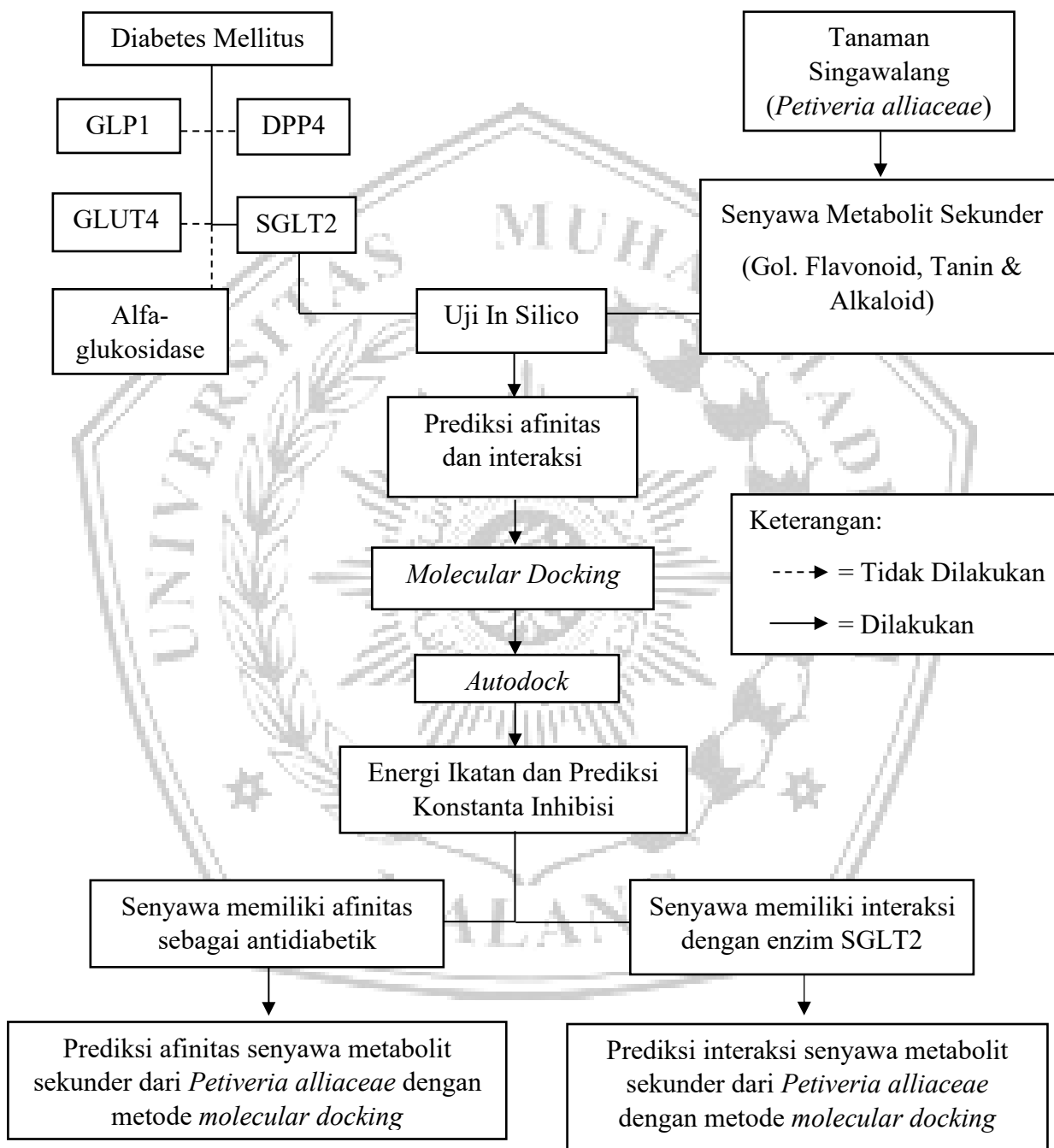


**BAB III**  
**KERANGKA KONSEPTUAL**

**3.1 Kerangka Konsep Penelitian**



**Gambar 3. 1** Kerangka Konsep Penelitian

### 3.2 Kerangka Bagian

Sebuah penelitian menemukan bahwa Tanaman Singawalang (*P. alliacea*) dapat dijadikan sebagai obat herbal antidiabetes. Tanaman Singawalang ini juga bisa digunakan untuk mengobati rasa sakit, flu, antiinflamasi, antitumor, antibakteri, antijamur, antihiperlipidemia, dan penyakit lainnya (Yani et al., 2011). Tanaman singawalang memiliki potensi untuk menurunkan kadar gula darah karena kandungan taninnya. Penelitian pada tikus dengan kondisi normal, diabetes, yang diberi metformin, dan yang diberi ekstrak singawalang dalam berbagai dosis menunjukkan bahwa singawalang dapat menurunkan kadar gula darah pada tikus (Gunawan et al., 2020).

DM adalah penyakit tidak menular yang serius di mana pankreas tidak dapat memproduksi insulin secara optimal. Insulin adalah hormon yang mengatur kadar glukosa dalam darah. Ketika insulin tidak berfungsi dengan baik, kadar glukosa darah menjadi tinggi. DM banyak dialami oleh masyarakat dan merupakan masalah kesehatan global, sehingga saat ini menjadi prioritas bagi para pemimpin dunia dalam menangani masalah kesehatan ini (Hasdiana, 2018).

Pada ginjal pasien penderita DM, SGLT2 memiliki peran penting dengan efek penghambatannya yang bergantung pada glukosa darah terhadap sistem kardiovaskular (Kuswandi et al., 2022). Penghambat SGLT2 bekerja dengan cara menyebabkan vasokonstriksi arterioral aferen dan potensi vasodilatasi eferen yang disebabkan karena aktivasi *feedback* tubuloglomerulus sebagai akibat dari banyaknya natrium yang melewati makula densa (Putrinarita, 2023).

Sehingga pada penelitian ini menggunakan metode *in silico* yaitu metode yang berbasis pada komputasi. Penggunaannya untuk informasi awal yang diduga memiliki sifat farmakologis serta meningkatkan efisiensi optimasi aktivitas senyawa (Bare et al., 2019). Adapun keunggulan dari metode ini lebih murah dan lebih cepat dalam menghasilkan hasil. Upaya besar telah difokuskan pada pengembangan pendekatan komputasi untuk penelitian ilmiah, seperti prediksi toksisitas (Makatita et al., 2020). Dengan cara mensimulasikan kondisi atau situasi nyata di komputer, yang bertujuan untuk meningkatkan efisiensi dan akurasi dalam perancangan obat. Skrining *in silico* melibatkan penambahan struktur molekul yang relevan ke dalam basis data protein target (Shofi, 2022). Metode *molecular docking*

merupakan metode *in silico* yang sering digunakan untuk memprediksi orientasi ikatan antara molekul kecil calon obat dan protein targetnya, guna memperkirakan afinitas dan aktivitas molekul kecil tersebut. Oleh karena itu, *molecular docking* memiliki peran penting dalam penemuan dan desain obat secara rasional. Tujuan utama simulasi *molecular docking* adalah untuk mengidentifikasi calon lead compound (Prasetyawati et al., 2021). Metode *molecular docking* ini dapat memprediksi lokasi, konformasi, orientasi, dan interaksi suatu molekul pada situs pengikatan protein target. Interaksi antara ligan dengan protein target melalui *molecular docking* dapat memberikan nilai afinitas dan model interaksi ligan terhadap protein target (Ni Luh Ari Krisma Anjani & Ni Putu Linda Laksmiani, 2023).

Autodock adalah perangkat lunak untuk penambatan molekul yang digunakan untuk memprediksi interaksi antara senyawa dan protein target. Autodock terdiri dari dua program: AutoDock untuk simulasi penambatan molekul dan Autogrid untuk membuat ruang tiga dimensi tempat ligan berada sebelum penambatan molekul dilakukan. Autodock menawarkan berbagai algoritma seperti Lamarckian Genetic Algorithm dan dapat dijalankan di Graphics Processing Unit (GPU), sehingga mempercepat proses simulasi penambatan molekul. Perangkat ini juga dilengkapi dengan Graphical User Interface (GUI) bernama AutoDock Tools yang memudahkan penggunaannya. Autodock telah digunakan dalam berbagai penelitian, termasuk pengembangan obat baru, analisis aktivitas senyawa terhadap enzim, dan analisis docking molekuler untuk menilai potensi anti-inflamasi dari senyawa quersetin (Diyana Sakti Purwanto, Hari Susanti, 2021).

Dalam analisis *molekuler docking*, energi ikatan dan kontak residu (PKI) adalah dua parameter penting yang digunakan untuk menentukan kekuatan interaksi antara ligan dan protein target. Energi ikatan mengukur kekuatan ikatan kimia antara atom-atom dalam ligan dan protein, sedangkan PKI mengukur jarak dan orientasi atom-atom ligan terhadap residu protein. Dalam proses penyaringan, hasil energi ikatan dan PKI dibandingkan untuk menentukan ligan yang paling efektif berinteraksi dengan protein. Oleh karena itu, analisis energi ikatan dan PKI sangat penting dalam menentukan potensi aktivitas biologis suatu senyawa dan dalam pengembangan obat baru yang efektif dan selektif (Wardani, 2012).