

BAB 3 PROSEDUR PENELITIAN

3.1 Metode Penelitian

Jenis penelitian yang digunakan dalam penelitian ini adalah penelitian kualitatif dengan pendekatan fenomenologi untuk menyelidiki kebiasaan masyarakat Desa Sukahurip dalam memanfaatkan tanaman kencur (*Kaempferia galanga* L.) sebagai obat tradisional. Data yang diperoleh dari hasil survei etnobotani dan eksperimental laboratoris secara *in silico*. Menurut Sugiyono (2013) Metode penelitian kualitatif adalah metode penelitian yang berlandaskan filosofi postpositivisme, digunakan untuk kajian terhadap kondisi objek yang alamiah (berlawanan dengan eksperimen), dimana peneliti sebagai instrumen kunci, teknik pengumpulan data dilakukan dengan triangulasi (gabungan), analisis data bersifat induktif/kualitatif, dan hasil penelitian kualitatif lebih menekankan relevansi daripada generalisasi. Adapun pendekatan fenomenologi adalah perspektif teoretis yang mendukung penelitian tentang esensi-esensi yang merupakan pengalaman langsung terkait pengetahuan yang berasal dari kesadaran, atau cara kita dalam memahami sesuatu dengan mengalaminya secara sadar (Cohen *et al.*, 2018; Hasbiansyah, 2008).

3.2 Ruang Lingkup Penelitian

Berdasarkan latar belakang yang telah disampaikan, fokus penelitian yang dilakukan sebagaimana tercantum pada tabel 3.1.

Tabel 3. 1 Ruang Lingkup/Fokus Penelitian

| No. | Jenis Data | Aspek yang Dikaji (Data) | Sumber Data | Metode |
|-----|--|--|-------------|--|
| 1. | Kondisi umum lokasi penelitian di Desa Sukahurip | <ul style="list-style-type: none">• Luas dan letak geografis• Tata guna lahan• Kondisi Desa Sukahurip• Keadaan sosial, ekonomi, dan budaya masyarakat | Kantor Desa | <ul style="list-style-type: none">• Wawancara• Kajian pustaka |

| | | | | |
|----|--|---|---------------------------------------|---|
| 2. | Karakteristik informan | <ul style="list-style-type: none"> • Jenis kelamin • Usia • Pekerjaan • Tingkat Pendidikan | Masyarakat Desa Sukahurip | Wawancara |
| 3. | Etnobotani Tanaman Kencur sebagai obat herbal | <ul style="list-style-type: none"> • Intensitas penggunaan tanaman kencur sebagai obat herbal • Bagian yang digunakan sebagai obat herbal • Cara pengolahannya • Cara penggunaannya • Manfaat/khasiatnya | Masyarakat Desa Sukahurip | <ul style="list-style-type: none"> • Observasi • Wawancara • Studi Dokumen • Kajian Pustaka |
| 4. | Identifikasi senyawa <i>Etil Parametoksisinamat</i> (EPMS) | <ul style="list-style-type: none"> • Kandungan senyawa <i>Etil Parametoksisinamat</i> (EPMS) yang terdapat di rimpang kencur Desa Sukahurip | Ekstrak rimpang kencur Desa Sukahurip | <ul style="list-style-type: none"> • Ekstraksi maserasi • Uji <i>Gas Chromatography Mass Spectrometry</i> (GC-MS) |
| 5. | Studi <i>in silico</i> tanaman kencur sebagai obat herbal asma | <ul style="list-style-type: none"> • Sifat fisikokimia, farmakokinetik, dan prediksi toksisitas senyawa <i>Etil Parametoksisinamat</i> (EPMS) terhadap reseptor penyakit asma (AChM₃), dengan ligan pembanding <i>Atropine</i> dan <i>native ligand Tiotropium</i>. • Hasil simulasi <i>molecular docking</i> senyawa <i>Etil Parametoksisinamat</i> (EPMS) terhadap reseptor penyakit asma (AChM₃), dengan ligan pembanding <i>Atropine</i> dan <i>native ligand Tiotropium</i>. | Referensi yang Kredibel | <ul style="list-style-type: none"> • <i>Molecular docking</i> • Kajian Pustaka |

3.3 Sumber Data Penelitian

Dalam penelitian ini terdapat tiga data yang diteliti melalui sumber data sebagai berikut:

3.3.1 Studi Etnobotani

Sumber data dalam penelitian ini untuk studi etnobotani diperoleh dari beberapa informan kunci (*key informant*) dan non informan kunci di Desa Sukahurip yang memenuhi kriteria yang sudah ditentukan oleh peneliti. Untuk informan kunci meliputi:

- 1) Tabib yakni orang yang memiliki pemahaman terkait tumbuhan obat dalam pengobatan tradisional khususnya tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.) mengenai bagian organ tumbuhan yang sering dimanfaatkannya, cara pengolahannya, cara penggunaannya, dan khasiatnya terhadap penyakit tertentu, serta cenderung sering dikunjungi oleh masyarakat untuk berobat.
- 2) Sesepuh/tetua adat yakni orang yang memahami bagian organ tumbuhan kencur (*Kaempferia galanga* L.) yang sering dimanfaatkan, cara pengolahannya, cara penggunaannya, dan khasiatnya terhadap penyakit tertentu, tetapi cenderung tidak dikunjungi oleh masyarakat untuk berobat.

Untuk *non* informan kunci yang dimaksud dalam penelitian ini yakni orang yang memahami tentang tumbuhan obat khususnya tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.) dari informan kunci sekaligus turut mengonsumsinya. Data yang dijaring dari sumber data dengan melalui wawancara semi terstruktur yang dilengkapi dengan adanya studi dokumen.

3.3.2 Identifikasi Senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS) dari Rimpang Kencur (*Kaempferia galanga* L.) Desa Sukahurip

Dalam penelitian ini untuk melakukan identifikasi senyawa Etil Parametoksisinamat (EPMS) dari rimpang kencur (*Kaempferia galanga* L.) Desa Sukahurip, sumber data berasal rimpang kencur (*Kaempferia galanga* L.) Desa Sukahurip yang kemudian dijadikan ekstrak dengan metode ekstraksi maserasi dan diteliti lebih lanjut melalui uji *Gas Chromatography Mass Spectrometry* (GC-MS).

3.3.3 Studi *In Silico*

Adapun sumber data dalam penelitian ini untuk studi *in silico* diperoleh dari hasil tinjauan pustaka beberapa referensi yang digunakan oleh peneliti. Selanjutnya dilakukan analisis sifat fisikokimia, farmakokinetika, prediksi toksisitas, dan simulasi *molecular docking* dari senyawa uji EPMS, ligan pembanding *atropine*, dan *native ligand tiotropium* terhadap reseptor AChM₃ untuk menjawab dari pertanyaan penelitian dengan menggunakan perangkat keras berupa laptop dan perangkat lunak yang terdiri dari Windows 10 Ultimate 64 bit, Biovia Discovery Studio Visualizer, PyRx, PyMOL, *Lipinski rule of five* (<http://www.scfbio-iitd.res.in/software/drugdesign/lipinski.jsp>), Prediktor Pre-ADMET, Prediktor pkcsm *online tools*, Pro-Tox *Online Tool*, Pubchem, Protein Data Bank (<http://www.rcsb.org/pdb>), dan Microsoft Office 2021.

3.4 Langkah-langkah Penelitian

Adapun untuk langkah-langkah dalam penelitian ini terbagi menjadi tiga tahap, yaitu:

3.4.1 Tahap Persiapan

Tahap persiapan dalam penelitian ini terdapat beberapa langkah sebagai berikut:

- 1) Mendapatkan Surat Keputusan Dekan Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Siliwangi mengenai penetapan bimbingan skripsi pada tanggal 8 November 2022;
- 2) Mengajukan judul penelitian kepada Dosen Pembimbing I, Dosen Pembimbing II, dan Dewan Bimbingan Skripsi (DBS) pada November 2022;
- 3) Menyusun proposal penelitian dan melaksanakan bimbingan secara berkala dengan Dosen Pembimbing I dan Dosen Pembimbing II pada Desember 2022 – Februari 2023;
- 4) Mengajukan permohonan seminar proposal penelitian kepada Dewan Bimbingan Skripsi (DBS) pada 3 Maret 2023;






- 5) Melaksanakan seminar proposal penelitian dan mendapatkan saran serta masukan mengenai proposal penelitian dan pelaksanaan penelitian ke depannya pada 14 Maret 2023;
- 6) Memperbaiki dan mengonsultasikan proposal penelitian dengan Dosen Pembimbing I dan Dosen Pembimbing II berdasarkan saran dan masukan pada saat seminar proposal pada 3 April 2023;
- 7) Mengurus surat perizinan untuk melaksanakan penelitian yaitu meminta surat pengantar penelitian dari Dekan Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Siliwangi, Badan Kesatuan Bangsa dan Politik Kabupaten Ciamis, dan Kepala Desa Sukahurip yang ditujukan kepada Ketua RW/Tetua Adat di Desa Sukahurip pada 5 – 6 April 2023; dan
- 8) Mempersiapkan alat dan bahan yang digunakan pada saat penelitian pada Maret s.d. April 2023, untuk survei etnobotani alat dan bahan yang dibutuhkan meliputi: Alat tulis lengkap, *handphone*, pedoman wawancara, kamera, peta desa, profil desa. dan buku catatan. Adapun untuk identifikasi senyawa EPMS di laboratorium, bahan dan alat yang dibutuhkan meliputi: rimpang kencur dari Desa Sukahurip, etanol 96%, metanol, ember, pisau, blender, alat penyaring, timbangan analitik, cawan petri, *shaker*, gelas ukur, labu erlenmeyer, botol zat (gelap), corong buchner, spatula, oven, autoklaf, sikat tabung, kertas saring, aluminium foil, plastik hitam, sarung tangan latex, *polybag* atau plastik hitam, kapas, *tissue*, HP untuk dokumentasi, dan alat kromatografi gas spektroskopi massa. Kemudian untuk studi *in silico* alat dan bahan yang dibutuhkan meliputi: laptop dan *software* untuk melakukan *molecular docking*.




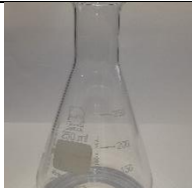
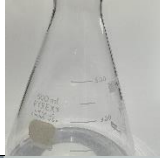


3.4.2 Tahap Pelaksanaan

Dalam tahap pelaksanaan ini terdapat beberapa alat dan bahan yang digunakan untuk pengambilan 3 data yang dibutuhkan dalam penelitian ini. Alat dan bahan yang digunakan dalam penelitian ini sebagaimana tertera pada tabel 3.2.

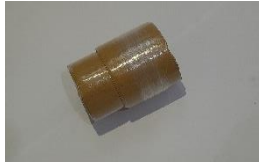

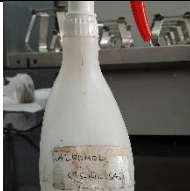



Tabel 3. 2 Alat dan Bahan


| No. | Alat dan | Spesifikasi dan | Jumlah | Gambar |
|-----|----------|-----------------|--------|--------|
|-----|----------|-----------------|--------|--------|




| | Bahan | Kegunaan | | |
|----|-------------------|--|--------|---|
| 1. | Pedoman Wawancara | Panduan bagi peneliti ketika melakukan wawancara dalam pengambilan data studi etnobotani tanaman kencur. | 1 | Format terlampir pada lampiran 1. |
| 2. | Alat Tulis | Buku dan pulpen untuk mencatat hal-hal penting selama penelitian. | 1 Buah |  |
| 3. | <i>Handphone</i> | Samsung A04S (menunjang dokumentasi berupa foto dan video selama penelitian). | 1 Buah |  |
| 4. | Baskom | Tempat untuk mencuci bersih rimpang kencur. | 1 Buah |  |
| 5. | Pisau dan Talenan | Mengiris rimpang kencur. | 1 Buah |  |
| 6. | Oven | Memmert (mengeringkan rimpang kencur). | 1 Buah |  |
| 7. | Blender | Menghaluskan rimpang kencur yang sudah kering. | 1 Buah | |

| | | | | |
|-----|------------------------------------|---|--------|---|
| 8. | Saringan | Menyaring serbuk rimpang kencur yang sudah diblender. | 1 Buah |  |
| 9. | Autoklaf | <i>Autoclave All American</i> (mensterilkan alat yang digunakan). | 1 Buah |  |
| 10. | Timbangan Analitik dan Cawan Petri | Menimbang simplisia rimpang kencur. | 1 Buah |  |
| 11. | Labu Erlenmeyer | Duran ukuran 250 ml (untuk melarutkan simplisia dengan larutan etanol pada saat shaking). | 5 Buah |  |
| 12. | Labu Erlenmeyer | Pyrex ukuran 500 ml (Melarutkan simplisia dengan larutan etanol pada saat <i>shaking</i>). | 3 Buah |  |
| 13. | <i>Shaker</i> | Thermoshake 500 Gerhardt (Menghomogenkan simplisia dan pelarut etanol 96%). | 1 Buah |  |
| 14. | Corong Buchner | Menyaring ekstrak rimpang kencur. | 1 Buah |  |

| | | | | |
|-----|-------------------------|---|------------|---|
| 15. | Gelas Kimia | Pyrex ukuran 100 ml (tempat untuk mendokumentasikan perbandingan hasil maserasi). | 2 Buah |  |
| 16. | Gelas Kimia | Pyrex ukuran 500 ml (Mengukur jumlah etanol yang digunakan). | 1 Buah |  |
| 17. | Botol Zat Gelap | Ukuran 2L (tempat melakukan maserasi rimpang kencur). | 2 Buah |  |
| 18. | Botol Zat Bening | Ukuran 1L (tempat untuk hasil maserasi akhir) | 1 Buah |  |
| 19. | Spatula | Mengambil ampas hasil maserasi rimpang kencur. | 1 Buah |  |
| 20. | Alumunium foil | Membungkus alat dan bahan yang disterilkan serta alat-alat yang digunakan. | Secukupnya |  |
| 21. | Plastik Piala dan Karet | Membungkus alat dan bahan yang disterilkan. | Secukupnya |  |

| | | | | |
|-----|---------------------------|---|------------|---|
| 22. | Plastik <i>Wrap</i> | Membungkus alat dan bahan yang disterilkan serta alat-alat yang digunakan. | Secukupnya |  |
| 23. | Kertas Saring | Menyaring hasil maserasi rimpang kencur. | Secukupnya |  |
| 24. | Akohol Sterilisasi | Sterilisasi beberapa alat yang digunakan. | Secukupnya |  |
| 25. | Sarung Tangan Latex | Melindungi tangan selama proses penelitian. | 4 Pasang |  |
| 26. | Etanol 96% | Pelarut dalam maserasi rimpang kencur. | 2,5 Liter |  |
| 27. | Laptop | Asus X415KA_A416KA yang dilengkapi dengan beberapa <i>software</i> dan program-program pendukung lainnya (untuk keperluan studi <i>in silico</i>). | 1 Buah |  |

| | | | | |
|-----|-------------------------------|--|------------|---|
| 28. | Rimpang Kencur Desa Sukahurip | Bahan segar/sampel penelitian | 3,5 Kg |  |
| 29. | Cobek & Mutu | Menghaluskan kencur dan beras. | 1 Buah |  |
| 30. | Gelas & Sendok | Mengonsumsi ramuan yang sudah dibuat. | 1 Buah |  |
| 31. | Mangkok | Tempat untuk ramuan yang sudah dibuat. | 1 Buah |  |
| 32. | Beras | Dijadikan tepung beras. | Secukupnya |  |
| 33. | Panci | Merebus ramuan yang dibuat. | 1 Buah |  |
| 34. | Sikat Tabung | Mencuci alat-alat laboratorium yang digunakan. | 1 Buah |  |

| | | | | |
|-----|---------------|---|------------|---|
| 35. | <i>Tissue</i> | Membersihkan dan mengeringkan alat-alat yang digunakan. | Secukupnya |  |
| 36. | Kompor | Memasak ramuan obat tradisional yang direbus. | 1 |  |
| 37. | Blender | Menghaluskan rimpang kencur | 1 |  |

Sumber: Dokumentasi Pribadi

Adapun dalam penelitian ini terdapat beberapa tahap pelaksanaan dan beberapa langkah baik untuk studi etnobotani dan studi *in silico*, diantaranya:

3.4.2.1 Studi Etnobotani

Pelaksanaan studi etnobotani dilakukan pada tanggal 6 April s.d. 6 Mei 2023 di Desa Sukahurip, Kecamatan Cihaurbeuti, Kabupaten Ciamis.

- 1) Melakukan survei etnobotani Tanaman Kencur (*Kaempferia galanga* L.) yaitu dengan melaksanakan wawancara semi terstruktur kepada *key informant* (tabib/dukun dan sesepuh/tetua adat) dan *non key informant* secara langsung di Desa Sukahurip tempat *key informant* dan *non key informant* tersebut. Wawancara dilakukan dengan bantuan pedoman wawancara, *handphone* untuk rekaman suara dan keperluan dokumentasi baik berupa foto maupun video. Hasil wawancara dicatat kembali untuk memastikan data-data pengkajian tanaman kencur (*Kaempferia galanga* L.); dan
- 2) Mendokumentasikan tanaman kencur (*Kaempferia galanga* L.) yang ada di Desa Sukahurip dan proses pengolahan serta penggunaannya sebagai obat herbal yang biasa dilakukan oleh masyarakat Desa Sukahurip Kabupaten Ciamis.

3.4.2.2 Identifikasi Senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS) dari Rimpang Kencur (*Kaempferia galanga* L.) Desa Sukahurip

- 1) Pembuatan simplisia rimpang kencur sebagaimana ditunjukkan pada gambar 3.1. dilakukan pada 27 Maret s.d. 14 April 2023 dengan rincian langkah sebagai berikut:
 - a) Rimpang kencur yang diperoleh dari Desa Sukahurip dibersihkan dan dicuci, kemudian dikeringkan tanpa terkena sinar matahari langsung;
 - b) Kemudian diiris tipis kurang lebih 3-5 mm dan dikeringkan menggunakan oven di laboratorium dengan suhu 60° C; dan
 - c) Setelah kering, rimpang kencur tersebut dihaluskan menggunakan blender hingga menjadi serbuk, kemudian disaring menggunakan saringan.

**A****B****C****D**



E

Gambar 3. 1 Proses pencucian rimpang kencur (*Kaempferia galanga* L.) (A), Proses pengeringan di bawah sinar matahari (B), Rimpang kencur (*Kaempferia galanga* L.) yang sudah diiris tipis (C), Proses pengeringan menggunakan Oven (D), dan Simplisia rimpang kencur (E)

Sumber: Dokumentasi Pribadi

- 2) Sterilisasi alat dan bahan dilakukan pada 16 Mei 2023 yang bertujuan agar terhindar dari mikroorganisme pengganggu lainnya yang dapat mempengaruhi hasil penelitian. Adapun tahap sterilisasi ini sebagaimana yang ditunjukkan pada gambar 3.2 dengan rincian langkah sebagai berikut:
 - a) Mencuci bersih alat-alat yang digunakan;
 - b) Membungkus alat dan bahan yang disterilisasi dengan menggunakan *aluminium foil* pada bagian tutupnya, kemudian dilapisi dengan plastik piala dan diikat dengan karet;
 - c) Memasukkan alat dan bahan yang digunakan ke dalam autoklaf selama 60 menit dengan suhu 121° C tekanan 2 atm;
 - d) Mematikan pemanas dan menunggu tekanan sampai 0;
 - e) Mengeluarkan alat dan bahan dari autoklaf;
 - f) Meniriskan alat dan bahan yang telah disterilisasi; dan
 - g) Alat dan bahan siap untuk digunakan.



Gambar 3. 2 Proses pencucian alat-alat (A), Proses membungkus alat-alat yang disterilisasi (B), Memasukkan alat dan bahan ke dalam autoklaf (C), Proses sterilisasi menggunakan autoklaf selama 60 menit (D), Proses mengeluarkan dan meniriskan alat dan bahan yang sudah disterilisasi (E), dan Alat dan bahan yang siap digunakan (F)

Sumber: Dokumentasi Pribadi

- 3) Pembuatan ekstrak dengan metode ekstraksi maserasi sebagaimana ditunjukkan pada gambar 3.3 dilakukan pada tanggal 19 – 21 Mei 2023 dengan rincian langkah sebagai berikut:

- a) Serbuk simplisia ditimbang beratnya sebanyak 250 gram, kemudian dimasukkan masing-masing 20 gram ke dalam 5 labu erlenmeyer yang berukuran 250 ml dan masing-masing sebanyak 50 gram ke dalam 3 labu erlenmeyer yang berukuran 500 ml;
- b) Setelah itu, ditambahkan pelarut etanol 96% ke masing-masing labu erlenmeyer dengan perbandingan 1:10, hingga serbuk simplisia terendam;
- c) Labu erlenmeyer yang sudah diisi dengan simplisia dan pelarut ditutup menggunakan *aluminium foil* dan dilapisi dengan plastik wrap untuk mencegah terjadinya proses penguapan etanol;
- d) Setelah itu, semua labu erlenmeyer diletakkan di *shaker* untuk proses homogenisasi selama 6 jam;
- e) Larutan yang sudah homogen kemudian dipindahkan ke dalam botol zat berwarna gelap ukuran 2 liter dengan disaring terlebih dahulu menggunakan corong buncher;
- f) Botol zat tersebut ditutup dengan *aluminium foil*, karet, plastik wrap, ditutup menggunakan tutup botol tersebut, dan dilapisi kembali dengan plastik *wrap*. Proses maserasi dilakukan selama 3 hari dengan dilakukan proses penyaringan setiap satu hari sekali menggunakan corong buncher dan kertas saring; dan
- g) Hasil penyaringan pada hari ketiga kemudian dimasukkan ke dalam botol zat berwarna bening dengan ukuran 1 liter kemudian ditutup dengan dilapisi *aluminium foil* dan plastik wrap.



A



B



C



D



E



F



G



H



I



J

Gambar 3. 3 Penimbangan simplisia rimpang kencur (A), Penambahan pelarut etanol 96% (B), Penutupan labu erlenmeyer menggunakan *aluminium foil* (C), Pelapisan *plastik wrap* pada labu erlenmeyer (D),

Proses homogenisasi (E), Filtrat yang sudah homogen (F), Proses memasukkan filtrat ke dalam botol zat gelap (G), Proses maserasi (H), Penyaringan hasil maserasi (I), dan filtrat akhir setelah maserasi selama 3 hari (J)

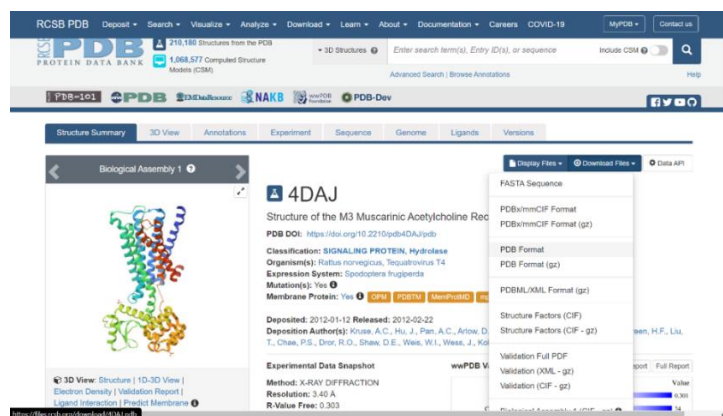
Sumber: Dokumentasi Pribadi

- 4) Identifikasi senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS) dari rimpang kencur yaitu dengan cara filtrat akhir hasil maserasi selanjutnya dilakukan uji *Gas Chromatography Mass Spectrometry* (GC-MS) untuk mengidentifikasi dan mengukur kemurniannya menggunakan instrumen kromatografi gas spektrometri massa (KGMS) yang dilakukan pada 30 Mei – 14 Juni 2023.

3.4.2.3 Studi *In Silico*

Studi *in silico* dalam penelitian ini dilakukan pada bulan Mei – Juni 2023.

- 1) Analisis Sifat Fisikokimia, Farmakokinetika, dan Prediksi Toksisitas
 - a) Mengunduh berkas reseptor AChM₃ seperti yang disajikan pada gambar 3.4 melalui situs <https://www.rcsb.org/> dengan kode 4DAJ dalam format pdb dan simpan dalam satu *folder* yang sama dengan berkas-berkas lainnya yang digunakan pada saat melakukan *molecular docking*;

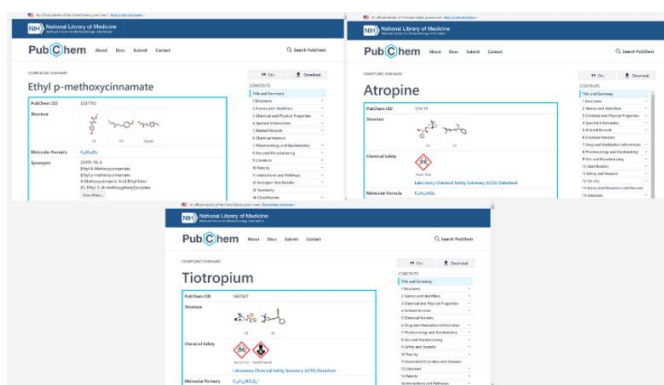


Gambar 3. 4 Mengunduh Berkas Reseptor AChM₃

Sumber: <https://www.rcsb.org/>

- b) Mengunduh berkas ligan senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS), ligan pembanding *Atropine*, dan *native ligand Tiotropium* sebagaimana yang disajikan pada gambar 3.5 melalui situs

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> dalam 3D Conformer dengan format SDF dan simpan dalam *folder* yang sama dengan berkas-berkas lainnya yang digunakan pada saat melakukan *molecular docking* dibuat masing-masing dalam *folder* yang berbeda untuk satu ligan dan satu reseptornya;



Gambar 3. 5 Mengunduh Ligan Senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS), ligan pembanding *Atropine*, dan *native ligand Tiotropium*

Sumber: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

- c) Analisis sifat fisikokimia menyelidiki *Lipinski Rule of Five* sebagaimana disajikan pada gambar 3.6 yang dilakukan melalui <http://www.scfbio-iitd.res.in/software/drugdesign/lipinski.jsp>. Adapun untuk langkah-langkahnya klik <http://www.scfbio-iitd.res.in/software/drugdesign/lipinski.jsp> pada *google chrome*, kemudian *input ligand file* pada kolom yang tersedia. Setelah itu klik *submit* dan hasil prediksi akan muncul. Selanjutnya lakukan *screenshot* dan analisis melalui studi literatur.

Supercomputing Facility for Bioinformatics & Computational Biology, IIT Delhi

SCFBio

Home | Group | Publications | Resources | Webmail | Contact Us

Lipinski Rule of Five

Lipinski rule of 5 helps in distinguishing between drug like and non drug like molecules. It predicts high probability of success or failure due to drug likeness for molecules complying with 2 or more of the following rules

- Molecular mass less than 500 Dalton
- High lipophilicity (expressed as LogP less than 5)
- Less than 5 hydrogen bond donors
- Less than 10 hydrogen bond acceptors
- Molar refractivity should be between 40-130

These filters help in early preclinical development and could help avoid costly late-stage preclinical and clinical failures .To draw a chemical structure [Click Here](#) and follow the instructions given.

Step 1: Input Drug File.

Input PDB file No file chosen

Step 2 : Input pH Value

pH Value [Value ranges from 0.0 to 14.0]

Step 3: Click on 'Submit' to submit your job

How to Use the Tool

OPTION 1:-

- The input File should be in the following formats[*.pdb, *.mol, *.mol2, *.xyz, *.sdf, *.smi]
- The input file name should not contain whitespace(s).
- Browse and Upload the file.
- Click on Submit.
- If the results were not showing, please recheck you input file format and submit it again.

OPTION 2:-

Gambar 3. 6 Tampilan Situs Analisis Sifat Fisikokimia

Sumber: <http://www.scfbio-iitd.res.in/software/drugdesign/lipinski.jsp>

- d) Analisis sifat farmakokinetik seperti yang disajikan pada gambar 3.7 melalui *pkcsm online tool* meliputi absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi. Adapun untuk langkah-langkahnya klik <https://biosig.lab.uq.edu.au/pkcsm/prediction> pada *google chrome*, kemudian *input ligand file* pada kolom yang tersedia. Setelah itu “*choose prediction mode ADMET*”, dan hasil prediksi akan muncul. Selanjutnya unduh hasil prediksi dan analisis melalui studi literatur.

pkcSM Predict Theory Help Contact Acknowledgements Related Resources License (non-academic)

Pharmacokinetic properties

Input Molecules → Calculation of Pharmacokinetic Properties → ADMET Prediction

Step 1: Please provide a set of molecules (SMILES format)

Description

Upload your SMILES file: No file chosen

OR

Provide a SMILES string:

Example: CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(=O)O

Step 2: Please choose the prediction mode

Description

Prediction of pharmacokinetic properties

Run example

Disclaimer

No molecule information will be retained on the system after being uploaded by the user.

Gambar 3. 7 Tampilan Situs Analisis Sifat Farmakokinetik

Sumber: <https://biosig.lab.uq.edu.au/pkcsml/prediction>

- e) Prediksi toksisitas suatu senyawa seperti yang disajikan pada gambar 3.8 yang dilakukan menggunakan prediktor *pkcsml online tool* untuk menganalisis *Ames Toxicity* dan *Hepatotoxicity*. Selain itu melalui *Protox online tool* untuk menganalisis nilai LD_{50} dan kelas toksisitas. Adapun langkah-langkahnya klik https://tox-new.charite.de/prottox_II/index.php?site=home pada *google chrome*, kemudian pilih “*tox prediction*”. Selanjutnya *input pubchem name, canonical smiles*, dan gambarkan struktur senyawa yang dianalisis pada kolom yang tersedia, lalu klik “*start tox-prediction*”. Setelah hasilnya muncul, lakukan *screenshot*, dan analisis melalui studi literatur.

Gambar 3. 8 Tampilan Situs Prediksi Toksisitas

Sumber: https://tox-new.charite.de/prottox_II/index.php?site=home

- 2) Simulasi *Molecular Docking*
 - a) Mengunduh berkas reseptor AChM₃ melalui situs <https://www.rcsb.org/> dengan kode 4DAJ dalam format *pdb* dan simpan dalam satu *folder* yang sama dengan berkas-berkas lainnya yang digunakan pada saat melakukan *molecular docking*;
 - b) Mengunduh berkas ligan senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS), ligan pembanding *Atropine*, dan *native ligand Tiotropium* melalui situs <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> dalam *3D Conformer* dengan format

SDF dan simpan dalam *folder* yang sama dengan berkas-berkas lainnya yang digunakan pada saat melakukan *molecular docking*;

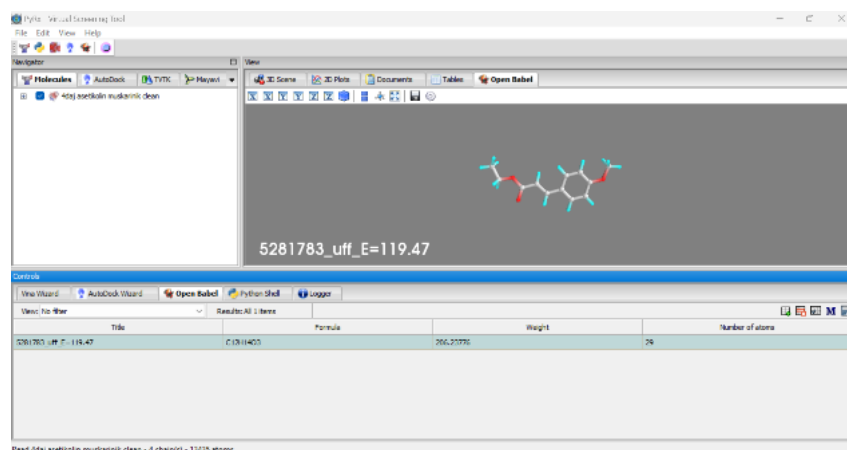
- c) Melakukan preparasi reseptor AChM₃ sebagaimana yang disajikan pada gambar 3.9 dengan cara pilih dan buka berkas reseptor yang sebelumnya sudah diunduh melalui *software* Biovia Discovery Studio Visualizer. Kemudian preparasi sedikit dengan cara pilih *Script* - > *Selection* - > *Select Water Molecules* dan pilih *delete*. Selanjutnya pilih *Script* - > *Selection* - > *Select Hetatm* dan pilih *delete*. Setelah itu *save as* dalam format *pdb*;



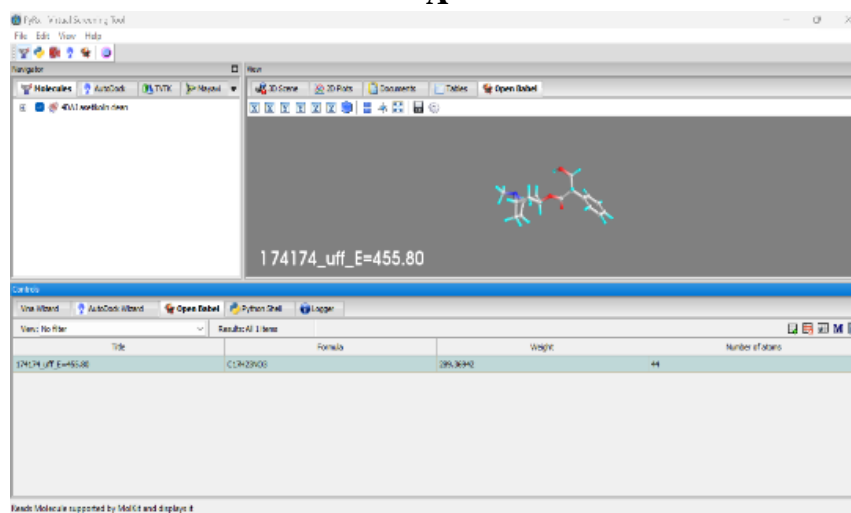
Gambar 3.9 Preparasi Reseptor AChM₃

Sumber: Biovia Discovery Studio Visualizer

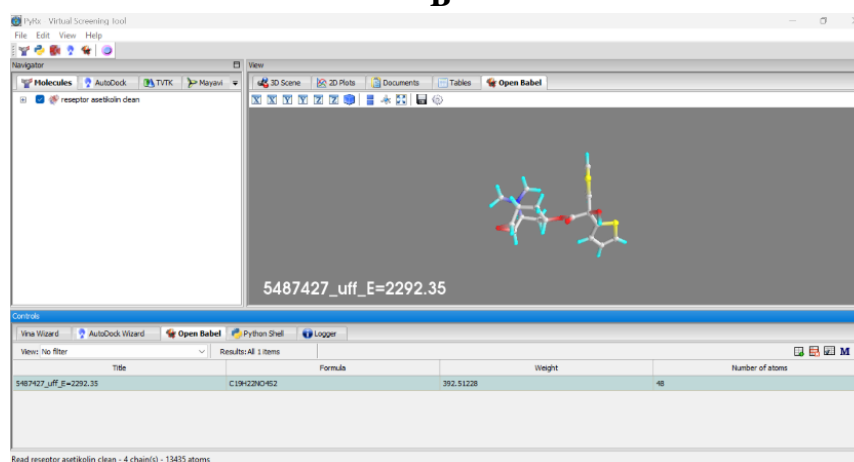
- d) Melakukan preparasi ligan sebagaimana yang disajikan pada gambar 3.10 dengan cara buka *software* PyRx kemudian klik *molecules* -> *load molecule* -> unggah berkas reseptor yang sudah dipreparasi pada langkah sebelumnya. Selanjutnya pilih *open babel* -> *insert new item* -> unggah berkas ligan yang sebelumnya sudah diunduh melalui *software* Biovia Discovery Studio Visualizer. Kemudian klik kanan pada opsi *formula* -> *minimize selected* -> lalu klik *ok* untuk meminimalisir energi agar mempermudah ketika proses *docking* berlangsung. Setelah itu klik kanan pada opsi *formula* -> *convert selected to autodock ligand (pdbq)*. Selanjutnya klik *molecules* -> klik kanan pada bagian berkas reseptor yang sudah dipreparasi -> pilih *Autodock* -> *make macromolecule*.



A



B

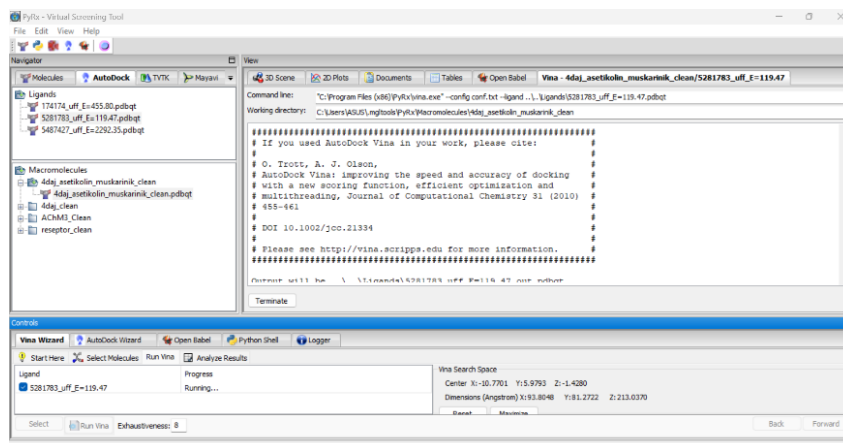


C

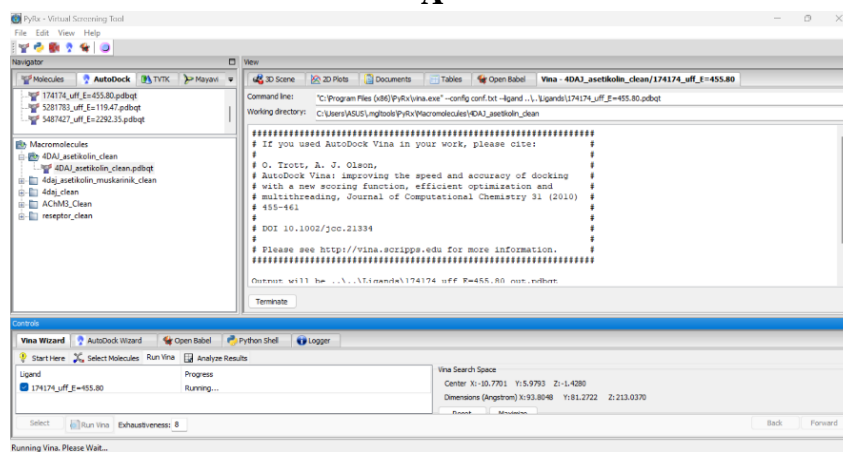
Gambar 3. 10 Preparasi Ligan Uji *Etil Parametoksisinamat* (EPMS) (A), Preparasi ligan pembanding *Atropine* (B), dan Preparasi *native ligand Tiotropium* (C)

Sumber: PyRx

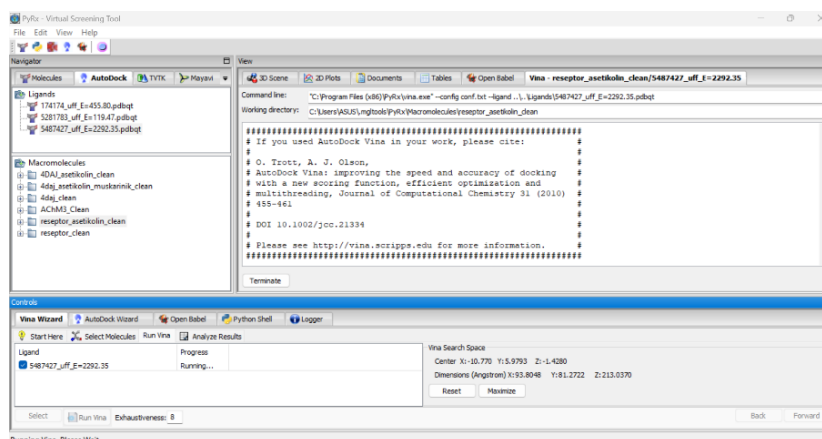
- e) Langkah selanjutnya pembuatan *grid box*, setelah langkah sebelumnya pada bagian (d) selanjutnya klik *vina wizard* -> *start* -> pilih ligan yang dianalisis -> *forward* -> pilih reseptor -> *maximize vina search space* -> *forward*, dan proses *docking* sedang berlangsung sebagaimana yang disajikan pada gambar 3.11. Ketika proses *docking* sudah selesai dan hasilnya sudah keluar, unduh hasil *docking* untuk dianalisis lebih lanjut. Setelah itu pilih *molecules* -> klik kanan pada bagian berkas hasil *docking* -> *save as pdb* dan simpan pada *folder* yang sama dengan sebelumnya.



A



B



C

Gambar 3. 11 Proses Docking Ligan Uji Etil Parametoksisinamat (EPMS) dengan Reseptor AChM₃ (A), Preparasi ligan pembeding *Atropine* dengan Reseptor AChM₃ (B), dan Preparasi *native ligand Tiotropium* dengan Reseptor AChM₃ (C)

Sumber: PyRx

- f) Visualisasi hasil dilakukan dengan cara langkah pertama yaitu membuka berkas hasil *docking* yang sebelumnya sudah di *save as pdb* menggunakan *software* PyMOL kemudian klik *file -> open ->* pilih berkas reseptor yang sudah dipreparasi. Setelah itu klik *file -> save molekul -> select* semua berkas yang ada *-> ok -> save as pdb*. Langkah kedua, buka *software* Biovia Discovery Studio Visualizer *-> file -> open ->* pilih *file* yang pada langkah sebelumnya sudah disimpan. Ubah *background* dengan pilih *script -> visualization -> publication quality*. Setelah itu klik *ligand interaction -> receptor -> hydrophobic* untuk melihat interaksi ligan. Selanjutnya untuk memunculkan label asam amino klik *interacting receptor atoms ->* klik kanan pada bagian yang berwarna kuning *-> labels -> add ->* pada bagian *object* pilih *Amino Acid*, bagian *attribute* pilih *3-Letter & ID#*, dan pada bagian warna pilih warna hitam untuk memberi kesan tegas *-> Ok*. Jika visualisasi 3D sudah terlihat, lakukan *capture* dengan posisi yang tepat. Untuk menampilkan visualisasi 2D klik opsi *show 2D Diagram* dan lakukan *capture* kembali untuk analisis lebih lanjut. Langkah terakhir, untuk melihat interaksi

ikatan asam amino dengan senyawa yang dianalisis yakni dengan cara klik tanda panah di bagian bawah -> klik *non bond* -> *screenshot* tabel hasil yang menunjukkan interaksi ikatan asam amino dengan senyawa yang dianalisis. Selanjutnya simpan *file* hasil analisis akhir di Biovia Discovery Studio Visualizer dengan cara klik *file* -> *save as pdb* di *folder* yang sama dengan sebelumnya.

- g) Melakukan analisis keseluruhan hasil *molecular docking* untuk menjawab pertanyaan penelitian melalui studi literatur.

3.4.3 Tahap Akhir

- 1) Mengolah data yang diperoleh dari hasil penelitian baik dari hasil studi etnobotani maupun studi *in silico* dilakukan pada Mei – Juli 2023;
- 2) Menyusun hasil dan pembahasan serta simpulan dan saran pada skripsi dari penelitian yang dilakukan dengan bimbingan bersama Dosen Pembimbing I dan Dosen Pembimbing II Juli – Oktober 2023;
- 3) Mengajukan permohonan seminar hasil penelitian kepada Dewan Bimbingan Skripsi pada 14 November 2023;
- 4) Melaksanakan seminar hasil penelitian dan mendapatkan saran serta masukan mengenai hasil penelitian pada skripsi pada 21 November 2023;
- 5) Memperbaiki dan mengonsultasikan skripsi dengan Dosen Pembimbing I dan Dosen Pembimbing II berdasarkan saran dan masukan pada saat seminar hasil penelitian;
- 6) Mencetak skripsi dalam bentuk *soft cover*;
- 7) Mengajukan permohonan ujian skripsi kepada Sekretaris Jurusan;
- 8) Melaksanakan ujian skripsi dan pengumuman kelulusan;
- 9) Memperbaiki dan mengonsultasikan skripsi dengan Dosen Pembimbing I dan Dosen Pembimbing II berdasarkan saran dan masukan pada saat ujian skripsi; dan
- 10) Mencetak skripsi dalam bentuk *hard cover*.

3.5 Teknik Pengumpulan Data

Teknik pengumpulan data dalam penelitian kualitatif ini yaitu menggunakan teknik triangulasi. Menurut sugiyono (2013) teknik triangulasi

merupakan teknik pengumpulan data yang menggabungkan berbagai teknik pengumpulan data dan sumber data yang ada. Ketika peneliti mengumpulkan data dengan menggunakan triangulasi, sebenarnya peneliti mengumpulkan data yang sekaligus menguji kredibilitas data tersebut yaitu memverifikasi kredibilitas data menggunakan teknik pengumpulan data yang berbeda dan sumber data yang berbeda. Triangulasi teknik artinya peneliti menggunakan teknik pengumpulan data yang berbeda untuk mendapatkan informasi dari sumber yang sama. Peneliti menggunakan observasi partisipatif, wawancara mendalam, dan dokumentasi untuk sumber data yang sama. Triangulasi sumber mengacu pada informasi dari sumber yang berbeda menggunakan teknik yang sama.

Oleh karena itu, dalam penelitian ini teknik pengumpulan data yang dilakukan untuk studi etnobotani tumbuhan obat kencur yaitu melalui observasi, teknik wawancara semi terstruktur, dan dilengkapi dengan studi dokumentasi. Adapun teknik pengumpulan data yang dilakukan untuk studi *in silico* dalam penelitian ini yaitu melalui tinjauan pustaka dari beberapa referensi untuk menentukan ligan dan reseptor yang selanjutnya dilakukan analisis sifat fisikokimia, farmakokinetika, prediksi toksisitas, simulasi *molecular docking*, dan simulasi *molecular dynamic* dari ligan dan reseptor tersebut. Berikut deskripsi singkat mengenai teknik pengumpulan data yang dilakukan dalam penelitian ini:

1. Studi Pendahuluan/Observasi

Studi pendahuluan ini dilakukan tujuannya untuk menentukan informan kunci (*key informan*). Informan kunci yang dimaksud ialah orang yang memahami terkait pemanfaatan tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.) meliputi: 1) tabib/dukun, 2) sesepuh desa atau tetua adat, dan *non key informant* yakni masyarakat umum yang sering memanfaatkan tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.) sebagai obat tradisional,

2. Survei Etnobotani

Survei etnobotani yang dilakukan yaitu meliputi survei lapangan, wawancara, dan pengambilan sampel. Untuk mengetahui kearifan lokal masyarakat di Desa Sukahurip terhadap tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.), maka dilakukan wawancara dengan penduduk di Desa Sukahurip,

Kecamatan Cihaurbeuti, Kabupaten Ciamis secara semi terstruktur dengan berpedoman pada daftar pertanyaan mencakup: 1) intensitas penggunaan tanaman kencur sebagai obat herbal, 2) bagian tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.) yang dimanfaatkan oleh masyarakat Desa Sukahurip, 3) cara pengolahan tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.) oleh masyarakat Desa Sukahurip, 4) cara penggunaan tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.) oleh masyarakat Desa Sukahurip, dan 5) khasiatnya terhadap jenis penyakit tertentu, serta dokumentasi. Berikut untuk kisi-kisi wawancara secara lengkapnya sebagaimana terlampir pada tabel 3.3.

Tabel 3. 3 Kisi-kisi wawancara

| Identitas Responden | |
|--|----------------|
| Pertanyaan | Jawaban |
| Nama Responden | |
| Umur | |
| Jenis Kelamin | |
| Bahasa yang Diakui | |
| Pendidikan Terakhir | |
| Pekerjaan | |
| Alamat | |
| Tingkat Penggunaan Tumbuhan Obat | |
| Pertanyaan | Jawaban |
| Sejak kapan menggunakan tanaman kencur sebagai obat herbal? | |
| Seberapa sering menggunakan tanaman kencur sebagai obat herbal? | |
| Bagian manakah dari tanaman kencur yang sering digunakan sebagai obat herbal? | |
| Dari mana memperoleh pengetahuan mengenai bagian dari tanaman kencur tersebut dapat digunakan sebagai obat herbal? | |
| Bagaimana cara pengolahan tanaman kencur untuk digunakan sebagai obat herbal? | |
| Dari mana memperoleh pengetahuan mengenai cara pengolahan tanaman kencur untuk digunakan sebagai obat herbal? | |
| Bagaimana cara penggunaan | |

| | |
|---|--|
| tanaman kencur sebagai obat herbal? | |
| Dari mana memperoleh pengetahuan mengenai cara penggunaan tanaman kencur untuk digunakan sebagai obat herbal? | |
| Bagaimana cara memperoleh tanaman kencur untuk dijadikan sebagai obat herbal? | |
| Keluhan/penyakit apa saja yang dapat diatasi menggunakan tanaman kencur sebagai obat herbalnya? | |
| Dari mana memperoleh pengetahuan mengenai jenis keluhan/penyakit yang dapat diatasi menggunakan tanaman kencur sebagai obat herbal? | |
| Apa kelebihan tanaman kencur dibandingkan tumbuhan obat lainnya? | |

3. Studi Dokumentasi

Dokumentasi dilakukan selama proses pengambilan data dari sumber data baik berupa catatan-catatan selama di lapangan maupun berupa foto dan rekaman selama proses pengambilan data.

4. Identifikasi Senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS) dari Rimpang Kencur (*Kaempferia galanga* L.) Desa Sukahurip

Dalam proses identifikasi senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS) dari rimpang kencur (*Kaempferia galanga* L.) Desa Sukahurip teknik pengambilan data yang dilakukan yaitu dengan pembuatan ekstrak rimpang kencur (*Kaempferia galanga* L.) menggunakan metode maserasi, identifikasi senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS) dari Rimpang Kencur (*Kaempferia galanga* L.) Desa Sukahurip dengan dilakukan uji Kromatografi Gas Spektrometri Masa (KGMS).

5. Studi *In Silico*

Studi *in silico* dilakukan pertama yaitu dengan melakukan tinjauan pustaka dari beberapa referensi untuk menentukan ligan dan reseptor yang digunakan dalam studi *in silico* ini. Kemudian, ketika sudah berhasil menentukan ligan dan reseptor yang digunakan, maka selanjutnya mempersiapkan alat dan bahan yang

selanjutnya dilakukan analisis sifat fisikokimia, farmakokinetika, prediksi toksisitas, dan simulasi *molecular docking* dari ligan dan reseptor tersebut.

3.6 Teknik Analisis Data

Sugiyono (2013) mengatakan bahwa analisis data kualitatif adalah proses mengambil dan menyusun informasi secara sistematis dari hasil wawancara, catatan lapangan, dan dokumentasi dengan mengorganisasikan data dalam kategori-kategori, menguraikannya ke dalam unit-unit, menyintesiskannya, menggabungkannya ke dalam pola, dan memilih mana yang penting dan apa yang harus dilakukan untuk dipelajari dan ditarik kesimpulan dengan cara yang mudah dipahami oleh diri sendiri dan orang lain.

Teknik analisis data yang digunakan yaitu secara analisis deskriptif kualitatif yang disajikan dalam bentuk tabel dan diagram dilengkapi dengan gambar proses pemanfaatan tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.) yang secara etnobotani dimanfaatkan oleh masyarakat Desa Sukahurip sebagai obat herbal. Data kualitatif diperoleh dari hasil wawancara dan studi dokumentasi dengan masyarakat Desa Sukahurip serta dilengkapi dengan hasil studi literatur mengenai bagian tumbuhan yang digunakan, cara pengolahan, cara penggunaan, cara memperoleh, dan jenis penyakit yang dapat disembuhkan dengan memanfaatkan tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.).

Sugiyono (2013) mengatakan bahwa analisis data dalam penelitian kualitatif dilakukan selama pengumpulan data dan dalam jangka waktu tertentu setelah pengumpulan data berakhir. Pada saat wawancara, peneliti menganalisis jawaban responden. Jika setelah dilakukan analisis, jawaban yang diajukan tidak memuaskan, maka peneliti melanjutkan pertanyaan lagi sampai suatu saat informasi dianggap dapat diandalkan.

Miles and Huberman (dalam Sugiyono, 2013) menyatakan bahwa kegiatan analisis data kualitatif dilakukan secara interaktif dan berkesinambungan hingga akhir agar datanya jenuh. Aktivitas analisis data yaitu reduksi data, penyajian data, dan penarikan kesimpulan/verifikasi.

1. Reduksi Data (*Data Reduction*)

Banyak informasi yang didapat dari lapangan, oleh karena itu harus dicatat secara cermat dan detail. Seperti yang telah disebutkan, semakin lama peneliti berada di lapangan, semakin rumit dan kompleks kumpulan datanya. Oleh karena itu, analisis data harus segera dilakukan dengan menggunakan reduksi data. Reduksi data berarti meringkas, menetapkan prioritas, memfokuskan pada yang hakiki, mencari tema, dan pola. Data yang direduksi dengan demikian memberikan gambaran yang lebih jelas dan memudahkan peneliti untuk mengumpulkan data dan mencarinya bila diperlukan. Pada perangkat elektronik seperti komputer mini, reduksi data dapat didukung dengan pemberian kode untuk hal-hal tertentu.

Ketika mereduksi data, setiap peneliti berfokus pada tujuan yang dapat dicapai. Tujuan utama penelitian kualitatif adalah temuan. Sehingga jika peneliti menemukan sesuatu yang aneh, tidak diketahui, belum ada polanya, maka peneliti harus memperhatikan hal tersebut dengan cara mereduksi data.

2. Penyajian Data (*Data Display*)

Dalam penelitian kualitatif, penyajian data dapat berupa uraian singkat, diagram, hubungan antar kategori, *flowchart*, dan sejenisnya. Dalam penelitian kualitatif, paling sering disajikan dalam teks naratif. Dengan melihat data, lebih mudah untuk memahami apa yang terjadi untuk merencanakan pekerjaan selanjutnya berdasarkan data tersebut apa yang dipahami. Disarankan dalam penyajian data, selain teks naratif dapat juga menggunakan bentuk grafik, matriks, jejaring kerja, dan diagram.

3. Kesimpulan

Kesimpulan awal yang disajikan masih bersifat awal dan dapat berubah kecuali ditemukan bukti kuat yang mendukung tahap pengumpulan data selanjutnya. Namun jika kesimpulan yang disajikan pada tahap awal didukung oleh bukti-bukti yang valid dan konsisten, maka ketika peneliti kembali ke lapangan untuk mengumpulkan data, maka kesimpulan yang disajikan merupakan kesimpulan yang masuk akal. Hasil penelitian kualitatif merupakan penemuan baru yang belum pernah ada sebelumnya. Temuan dapat berupa deskripsi atau gambaran suatu objek yang sebelumnya remang-remang atau tidak jelas sehingga

menjadi jelas pada saat pemeriksaan, dapat berupa hubungan kausal atau interaktif, hipotesis atau teori.

Adapun untuk teknik analisis data dari hasil studi *in silico* yaitu secara deskriptif berupa hasil dari analisis sifat fisikomia, farmakokinetika, prediksi toksisitas, dan simulasi *molecular docking*, senyawa *Etil Parametoksisinamat* (EPMS) yang terdapat pada tumbuhan obat kencur (*Kaempferia galanga* L.) terhadap salah satu reseptor Asma yaitu AChM₃ dengan ligan pembanding *Atropine* dan *native ligand Tiotropium*.

3.7 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan dalam waktu kurang lebih selama 3 bulan untuk proses pengambilan data yaitu April sampai dengan Juni dan pengolahan data serta penyusunan skripsi yaitu pada bulan Juli sampai dengan Oktober 2023, *time line* secara spesifiknya disajikan pada tabel 3.4. Adapun untuk tempat penelitian yang digunakan ketika proses pengambilan data dalam penelitian ini sebagaimana yang disajikan pada gambar 3.12 dan 3.13 yaitu di Laboratorium Botani Universitas Siliwangi, Laboratorium Penelitian dan Pengujian Terpadu Universitas Gadjah Mada, dan di Desa Sukahurip, Kecamatan Cihaurbeuti, Kabupaten Ciamis.



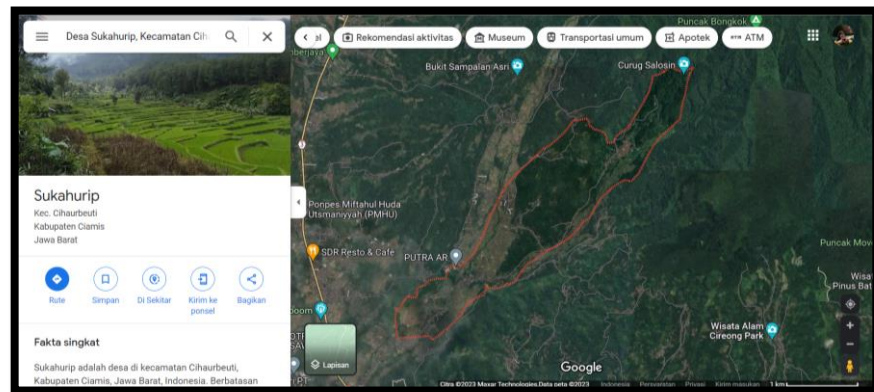
A



B

Gambar 3. 12 Laboratorium Botani Universitas Siliwangi (A) dan Laboratorium Penelitian dan Pengujian Terpadu Universitas Gadjah Mada (B)

Sumber: Dokumentasi Pribadi



Gambar 3. 13 Peta Lokasi Penelitian

Sumber: Google Maps

