

BAB 3

PROSEDUR PENELITIAN

3.1 Metode Penelitian

Metode penelitian yang digunakan adalah penelitian kualitatif deskriptif secara *in silico* menggunakan metode *molecular docking*. Sampel penelitian ini merupakan beberapa senyawa bioaktif yang terkandung pada tanaman secang (*Caesalpinia sappan* L.) yang berpotensi sebagai antidiabetes berdasarkan hasil uji GC-MS (*Gas Chromatography Mass Spectrometry*). Pada penelitian ini senyawa kontrol yang digunakan adalah *acarbose* yang didapatkan berdasarkan kajian literatur, sedangkan protein yang digunakan yaitu enzim α -amilase (PDB ID: 1B2Y). Pengujian ini dilakukan untuk mengetahui interaksi antara ligan dan reseptor dalam menemukan kandidat senyawa yang berpotensi sebagai pengontrol kadar gula darah dalam menghambat enzim α -amilase (PDB ID: 1B2Y).

Menurut (Basrowi & Suwandi, 2008) metode penelitian kualitatif melibatkan peneliti untuk mampu memahami dan mengenali latar belakang subjek dengan situasi dan fenomena alami sesuai dengan yang sedang diteliti. Penelitian kualitatif bertujuan untuk memahami kondisi suatu konteks dengan mengarahkan pada bentuk pendeskripsian secara rinci dan mendalam mengenai potret kondisi dalam suatu konteks yang alami (*natural setting*).

3.2 Ruang Lingkup Penelitian

Hal yang menjadi fokus dalam penelitian ini yaitu melakukan identifikasi senyawa yang terkandung dalam tanaman secang (*Caesalpinia sappan* L.) dengan metode ekstraksi maserasi lalu dilanjutkan dengan uji GC-MS (*Gas Chromatography Mass Spectrometry*) setelah itu dilakukan analisis *in silico* dengan metode *molecular docking* terkait senyawa yang terkandung dalam tanaman secang (*Caesalpinia sappan* L.) terhadap reseptor enzim α -amilase (1B2Y) yang berperan dalam patofisiologi diabetes untuk menganalisis potensi menjadi kandidat obat pengontrol kadar gula darah.

3.3 Sumber Data Penelitian

Sumber data pada penelitian ini terbagi menjadi data primer dan data sekunder. Data primer merupakan sebuah data yang diberikan langsung kepada pengumpul data, dalam artian peneliti mengumpulkan secara langsung dari sumber pertama atau objek penelitian yang sedang dilakukan. Sedangkan data sekunder merupakan sebuah data yang tidak diberikan langsung kepada pengumpul data, misalnya melalui orang lain atau dokumen (Sugiyono, 2015).

Sumber data primer dalam penelitian ini diantaranya yaitu identifikasi senyawa bioaktif yang terkandung dalam tanaman secang (*Caesalpinia sappan* L.) yang kemudian dijadikan ekstrak dengan metode ekstraksi maserasi dan diteliti lebih lanjut melalui uji GC-MS (*Chromatography Mass Spectrometry*) serta hasil biokomputasi *in silico* dengan metode *molecular docking*. Sumber data sekunder dalam penelitian ini berupa hasil studi literatur dari jurnal penelitian, *website* resmi, dan dokumentasi lainnya.

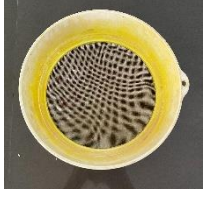
3.4 Langkah-langkah Penelitian

3.4.1 Alat dan Bahan

Dalam tahap pelaksanaan penelitian ini, terdapat beberapa alat dan bahan yang digunakan. Adapun alat dan bahan yang digunakan dalam penelitian ini sebagaimana tertera pada Tabel 3.1 dan Tabel 3.2 di bawah ini.

Tabel 3.1 Alat Penelitian

No.	Alat	Spesifikasi dan Kegunaan	Jumlah	Dokumentasi
1.	Alat Tulis	Buku dan pulpen untuk mencatat hal-hal penting selama penelitian.	1 Buah	
2.	Laptop	Asus Vivobook E410MA yang dilengkapi dengan beberapa aplikasi pendukung keperluan studi <i>in silico</i> .	1 Buah	

No.	Alat	Spesifikasi dan Kegunaan	Jumlah	Dokumentasi
3.	<i>Smartphone</i>	iPhone 13 sebagai alat penunjang untuk dokumentasi selama penelitian.	1 Buah	
4.	Oven	Memmert sebagai alat untuk mengeringkan tanaman secang.	1 Buah	
5.	Blender	Digunakan untuk menghaluskan tanaman secang yang sudah kering.	1 Buah	
6.	Saringan	Digunakan untuk menyaring serbuk tanaman secang yang sudah diblender.	1 Buah	
7.	Autoklaf	<i>Autoclave All American</i> untuk mensterilkan alat yang digunakan.	1 Buah	
8.	Timbangan Analitik dan Cawan Petri	Digunakan untuk menimbang simplisia tanaman secang.	1 Buah	
9.	Labu Erlenmeyer	Pyrex 250 ml sebagai alat untuk melarutkan simplisia dengan larutan etanol 96% pada saat <i>shaking</i> .	2 Buah	

No.	Alat	Spesifikasi dan Kegunaan	Jumlah	Dokumentasi
10.	Labu Erlenmeyer	Pyrex 500 ml sebagai alat untuk melarutkan simplisia dengan larutan etanol 96% pada saat <i>shaking</i> .	2 Buah	
11.	Shaker Orbital	Thermoshake 500 Gerhardt sebagai alat untuk menghomogenkan simplisia dan pelarut etanol 96%.	1 Buah	
12.	Shaker Vertikal	Digunakan untuk menyangga labu erlenmeyer saat menghomogenkan larutan.	1 Buah	
13.	Corong Buchner	Digunakan untuk menyaring ekstrak tanaman secang.	1 Buah	
14.	Gelas Kimia	Pyrex 250 ml sebagai wadah untuk mendokumentasikan perbandingan hasil ekstraksi maserasi.	2 Buah	
15.	Gelas Kimia	Pyrex 500 ml sebagai wadah untuk mengukur jumlah etanol yang akan digunakan.	1 Buah	
16.	Botol Zat Gelap	Berukuran 250 ml sebagai wadah untuk melakukan ekstraksi maserasi tanaman secang.	2 Buah	

No.	Alat	Spesifikasi dan Kegunaan	Jumlah	Dokumentasi
17.	Botol Zat Bening	Berukuran 250 ml sebagai wadah untuk hasil ekstraksi maserasi akhir.	2 Buah	
18.	Spatula	Digunakan untuk mengambil bahan selama penelitian.	1 Buah	
19.	Alumunium Foil	Digunakan untuk membungkus alat dan bahan yang disterilkan dan digunakan.	Secukup nya	
20.	Plastik piala dan Karet	Digunakan untuk membungkus alat dan bahan yang telah disterilkan.	Secukup nya	
21.	Plastic Wrap	Digunakan untuk membungkus alat dan bahan yang telah disterilkan.	Secukup nya	
22.	Kertas Saring	Digunakan untuk menyaring hasil ekstraksi maserasi dari tanaman secang.	Secukup nya	

No.	Alat	Spesifikasi dan Kegunaan	Jumlah	Dokumentasi
23.	Sarung Tangan Latex	Digunakan untuk melindungi tangan selama proses penelitian.	6 Buah	
24.	Sikat Tabung	Digunakan untuk mencuci alat-alat laboratorium yang telah digunakan.	1 Buah	

Tabel 3.2 Bahan Penelitian

1.	Tanaman secang (<i>Caesalpinia sappan</i> L.)	Bahan yang digunakan sebagai sampel penelitian.	Secukupnya	
2.	Etanol 96%	Bahan yang digunakan sebagai pelarut dalam ekstraksi maserasi tanaman secang.	2 Liter	
3.	Alkohol Sterilisasi	Bahan yang digunakan untuk mensterilisasikan alat yang digunakan.	Secukupnya	

3.4.2 Tahap Identifikasi Senyawa

3.4.2.1 Pembuatan Simplisia

Adapun langkah-langkah dalam pembuatan simplisia tanaman secang (*Caesalpinia sappan* L.) sebagai berikut:

- Bersihkan lalu keringkan tanpa terkena sinar matahari secara langsung.
- Potong tipis tanaman secang lalu keringkan menggunakan oven di laboratorium Universitas Siliwangi dengan suhu sekitar 60°C.
- Setelah kering, haluskan menggunakan blender hingga menjadi serbuk halus lalu saring menggunakan saringan seperti pada Gambar 3.1 di bawah ini.



(a)



(b)

Gambar 3.1 Proses Pembuatan Simplisia

(a) Proses Pengeringan dan (b) Proses Penghalusan

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.4.2.2 Sterilisasi Alat dan Bahan Penelitian

Adapun langkah-langkah dalam sterilisasi alat dan bahan yang akan digunakan dalam penelitian sebagai berikut:

- Cuci hingga bersih alat-alat yang akan digunakan.
- Bungkus alat dan bahan menggunakan alumunium foil kemudian lapiasi menggunakan plastik dan ikat dengan karet.
- Masukkan alat dan bahan ke dalam autoklaf selama 60 menit dengan suhu 121°C pada tekanan 2 atm.

- d) Matikan autoklaf dan tunggu hingga tekanan menyentuh angka 0 lalu keluarkan alat dan bahan dari autoklaf.
- e) Tiriskan alat dan bahan yang telah disterilisasikan. Setelah itu alat dan bahan siap untuk digunakan seperti pada Gambar 3.2 di bawah ini.



(a)



(b)



(c)

Gambar 3.2 Proses Sterilisasi Alat

(a) Mencuci Alat, (b) Membungkus Alat, dan (c) Masukkan ke Autoklaf

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.4.2.3 Tahapan Ekstraksi Maserasi

Adapun langkah-langkah dalam pembuatan ekstrak tanaman secang dengan metode maserasi sebagai berikut:

- a) Serbuk simplisia ditimbang dengan berat sebesar 500 gram, lalu dimasukkan ke dalam labu erlenmeyer masing-masing berukuran 500 ml sebanyak 50 gram seperti pada Gambar 3.3 di bawah ini.



(a)



(b)

Gambar 3.3 Proses Penimbangan Simplisia

(a) Proses Menimbang Serbuk Simplisia dan (b) Bentuk Serbuk Simplisia

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- b) Tambahkan pelarut etanol 96% dengan perbandingan 1:10 hingga serbuk simplisia terendam seperti pada Gambar 3.4 di bawah ini.



Gambar 3.4 Proses Penambahan Etanol 96%

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- c) Tutup menggunakan aluminium foil dan lapiisi dengan plastik wrap untuk mencegah terjadinya proses penguapan etanol.

- d) Letakan labu erlenmeyer pada shaker untuk proses homogenisasi selama sekitar 6 jam seperti pada Gambar 3.5 di bawah ini.



(a)



(b)

Gambar 3.5 Proses Homogenisasi Larutan

- (a) Memasukkan Labu Erlenmeyer ke dalam *Shaker* dan
(b) Pengaturan Suhu *Shaker*

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

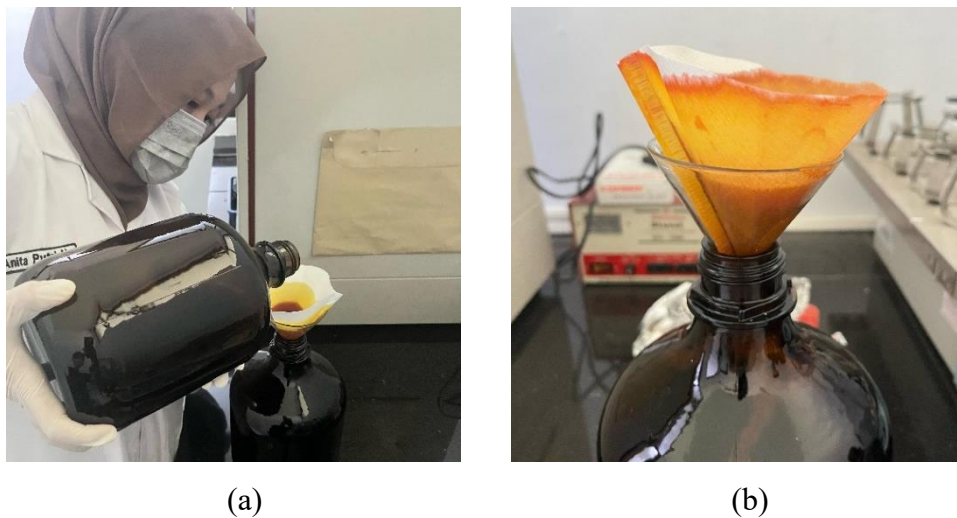
- e) Larutan yang sudah homogen disaring menggunakan corong buchner dan dipindahkan ke dalam botol zat gelap seperti pada Gambar 3.6 di bawah ini.



Gambar 3.6 Proses Pemindahan Larutan

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- f) Tutup menggunakan aluminium foil, plastik wrap, dan karet dengan rapat. Proses maserasi dilakukan selama 3 hari dengan proses penyaringan setiap hari menggunakan corong buchner dan kertas saring seperti pada Gambar 3.7.



Gambar 3.7 Proses Maserasi

(a) Penyaringan Hari Pertama dan (b) Penyaringan Hari Kedua

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- g) Hasil penyaringan pada hari ketiga dimasukkan ke dalam botol zat bening lalu tutup dengan aluminium foil dan plastik wrap seperti pada Gambar 3.8.



Gambar 3.8 Filtrat Hasil Maserasi Tanaman Secang

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

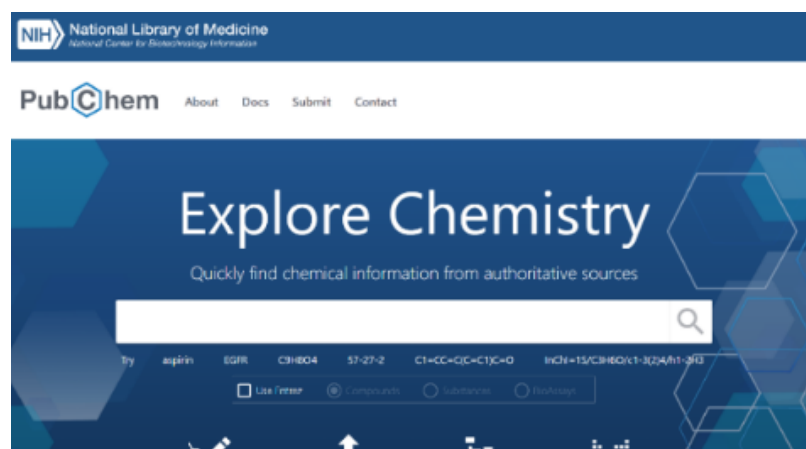
3.4.2.4 Tahapan Uji GC-MS (*Gas Chromatography Mass Spectrometry*)

Identifikasi senyawa bioaktif dari tanaman secang dengan cara filtrat akhir dari hasil ekstraksi maserasi yaitu dilakukan uji GC-MS (*Gas Chromatography Mass Spectrometry*) untuk mengidentifikasi dan mengukur kemurniannya menggunakan instrumen yang telah disusun dan dilakukan di Laboratorium Penelitian dan Pengujian Terpadu Universitas Gadjah Mada.

3.4.3 Tahap Pencarian dan Pengunduhan Ligan

Penentuan ligan dari senyawa bioaktif yang terkandung dalam tanaman secang dilakukan berdasarkan hasil uji GC-MS. Setelah ligan ditemukan, maka langkah selanjutnya yaitu mengunduh berkas ligan melalui *website* PubChem. Adapun langkah-langkah dalam pengunduhan berkas ligan sebagai berikut.

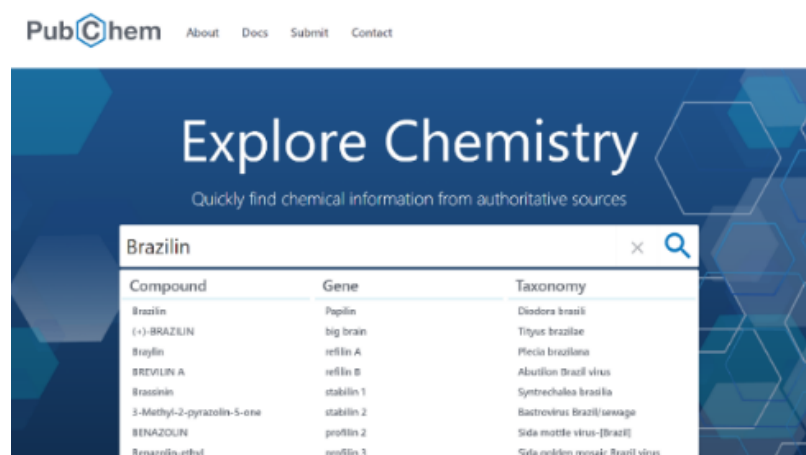
- a) Akses alamat *website* PubChem pada url <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> seperti pada Gambar 3.9 di bawah ini.



Gambar 3.9 Tampilan *Website* PubChem

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

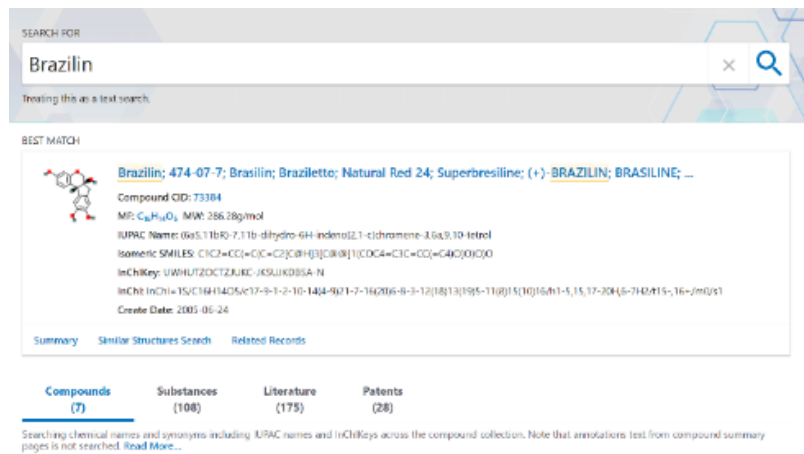
- b) Masukkan nama senyawa pada menu pencarian, lalu tekan *Enter* untuk memulai pencarian seperti pada Gambar 3.10 di bawah ini.



Gambar 3.10 Kolom Pencarian di PubChem

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- c) Klik pada hasil yang paling memenuhi kebutuhan atau *best match* untuk membuka informasi lebih detail seperti pada Gambar 3.11 di bawah ini.



SEARCH FOR
Brazilin

Treating this as a text search.

BEST MATCH

Brazilin; 474-07-7; Brasilin; Braziletto; Natural Red 24; Superbresiline; (+)-BRAZILIN; BRASILINE; ...

Compound CID: 73384
 MP: C₂₈H₂₄O₅ MW: 286.28g/mol
 IUPAC Name: (6aS,11bR)-7,11b-dihydro-6H-indeno[2,1-c]chromene-3,6a,9,10-tetrol
 Isomeric SMILES: C1C2=CC(=C)C=C2[C@H]3[C@H]1(COC4=CC(=CC(=C4)O)C)O
 InChIKey: UWHUTZOC7ZJUKC-RKSLKDBSA-N
 InChI InChI=1S/C28H24O5/c17-9-1-2-10-14(4-9)1-7-16(20-6-3-12)(18)13(19)5-11(8)15(10)16/h1-5,15,17-20(4,5-7)H/15-16-/m1/s1
 Create Date: 2005-05-24

Summary Similar Structures Search Related Records

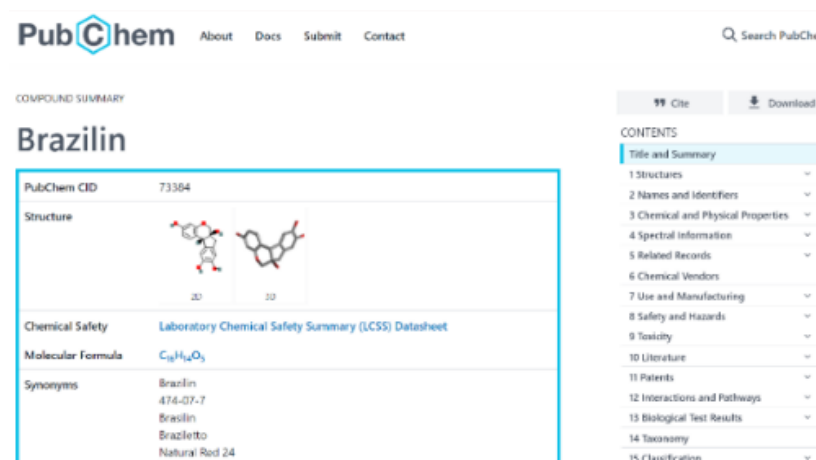
Compounds (7) Substances (108) Literature (175) Patents (28)

Searching chemical names and synonyms including IUPAC names and InChIKeys across the compound collection. Note that annotations text from compound summary pages is not searched. [Read More...](#)

Gambar 3.11 Hasil Pencarian Ligan di PubChem

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- d) Halaman berisi data informasi yang lebih lengkap mengenai senyawa yang dicari akan otomatis terbuka seperti pada Gambar 3.12 di bawah ini.



PubChem About Docs Submit Contact

Search PubChem

COMPOUND SUMMARY

Brazilin

PubChem CID: 73384

Structure

Chemical Safety: Laboratory Chemical Safety Summary (LCSS) Datasheet

Molecular Formula: C₂₈H₂₄O₅

Synonyms: Brazilin, 474-07-7, Brasilin, Braziletto, Natural Red 24

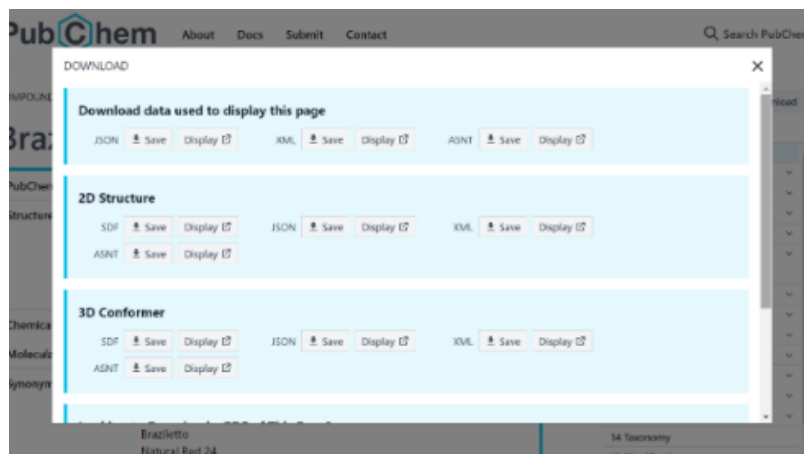
CONTENTS

- Title and Summary
- 1 Structures
- 2 Names and Identifiers
- 3 Chemical and Physical Properties
- 4 Spectral Information
- 5 Related Records
- 6 Chemical Vendors
- 7 Use and Manufacturing
- 8 Safety and Hazards
- 9 Toxicity
- 10 Literature
- 11 Patents
- 12 Interactions and Pathways
- 13 Biological Test Results
- 14 Taxonomy
- 15 Classification

Gambar 3.12 Informasi Ligan di PubChem

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- e) Klik *Download* untuk mengunduh struktur 3D, pilih *SDF Save* seperti pada Gambar 3.13 di bawah ini.



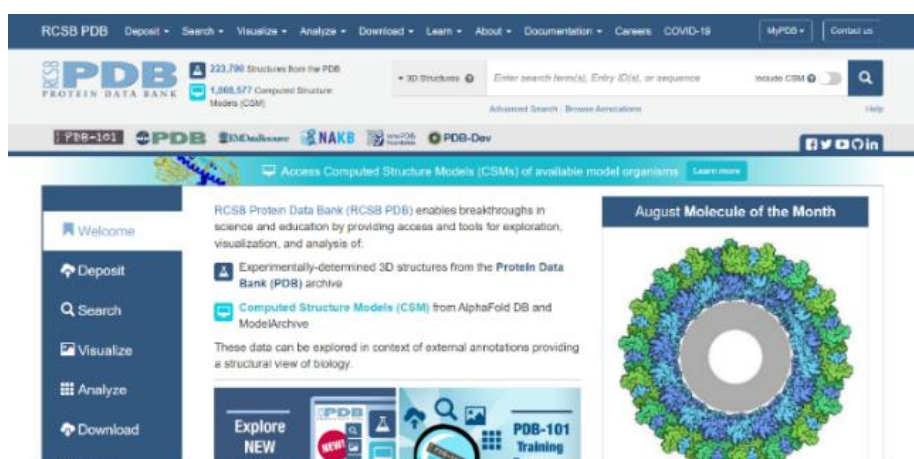
Gambar 3.13 *Download* Struktur Ligan

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.4.4 Tahap Pencarian dan Pengunduhan Reseptor

Pencarian reseptor dilakukan dengan cara studi literatur yang telah dilakukan sebelumnya. Hasil studi literatur yang dilakukan, ditemukan bahwa reseptor dari penyakit diabetes tersebut yaitu enzim α -amilase dengan kode PDB ID 1B2Y. Reseptor ini kemudian diunduh dalam format pdb di *website* RCSB dengan langkah-langkah sebagai berikut.

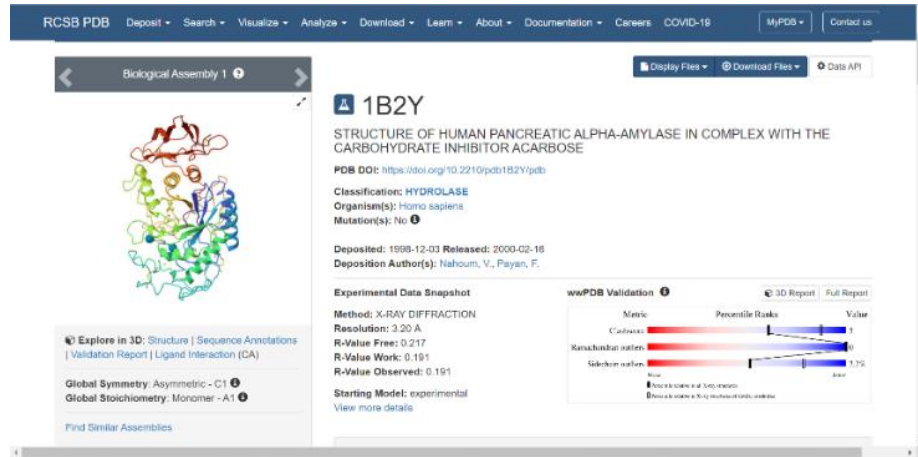
- a) Akses alamat *website* RCSB pada url <https://www.rcsb.org/> seperti pada Gambar 3.14 di bawah ini.



Gambar 3.14 Tampilan *Website* RCSB

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

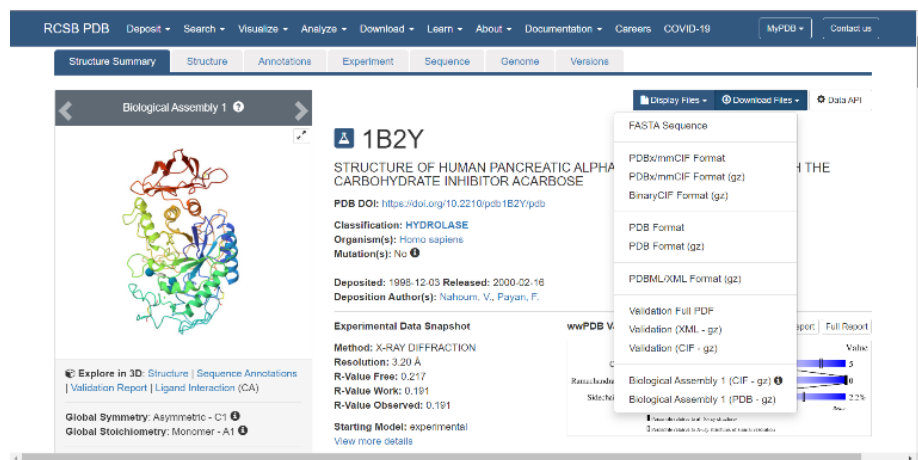
- b) Masukkan nama protein pada kolom pencarian, misalnya 1B2Y lalu tunggu seperti pada Gambar 3.15 di bawah ini.



Gambar 3.15 Informasi Reseptor di RCSB

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- c) Klik *Download Files* lalu pilih *PDB Format* untuk mengunduh file reseptor seperti pada Gambar 3.16 di bawah ini.



Gambar 3.16 Download Struktur Reseptor

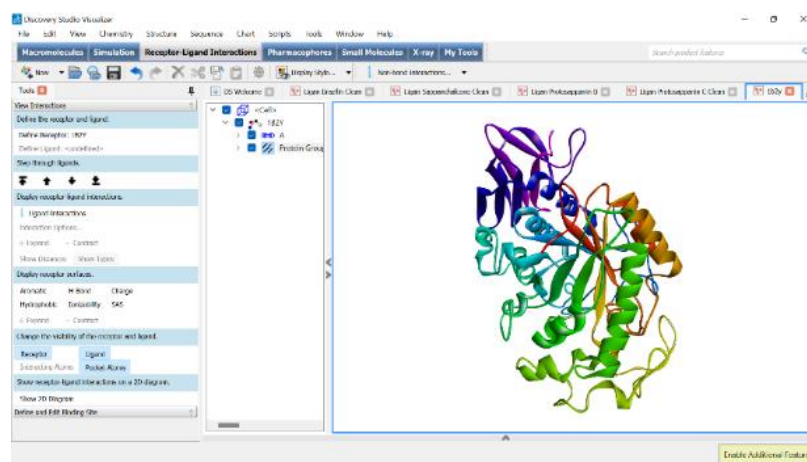
Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.4.5 Tahap Preparasi Ligan dan Reseptor

Setelah mengunduh berkas ligan dan berkas reseptor, maka tahap selanjutnya yaitu preparasi untuk memisahkan senyawa yang tidak diperlukan supaya interaksi penambatan ligan dan reseptor dapat dilakukan dengan baik.

a) Preparasi Reseptor

Langkah awal yang dilakukan yaitu dengan membuka berkas file reseptor yang sudah diunduh menggunakan aplikasi Discovery Studio Visualizer. Kemudian preparasi dimulai untuk memisahkan molekul air terlebih dahulu dengan cara klik **scripts** → **selection** → **select water molecules** → **delete**. Selanjutnya lakukan pemisahan *native ligands* hingga hanya tersisa reseptor dengan cara klik **scripts** → **selection** → **select ligands** → **delete**. Setelah itu klik **save as** dan simpan file tersebut dalam format pdb. Preparasi reseptor dapat dilihat pada Gambar 3.17.



Gambar 3.17 Preparasi Reseptor

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

Setelah reseptor di preparasi, perlu dilakukan validasi struktur 3D (Gambar 3.18) untuk mengetahui apakah struktur tersebut sudah cukup layak untuk diuji. Langkah pertama buka *website Saves 6.1* → **masukkan file reseptor** yang sudah di preparasi → gunakan parameter **ERRAT** untuk memvalidasi struktur reseptor yang akan digunakan dalam proses *docking*.

ERRAT Complete

Overall Quality Factor

96.8815

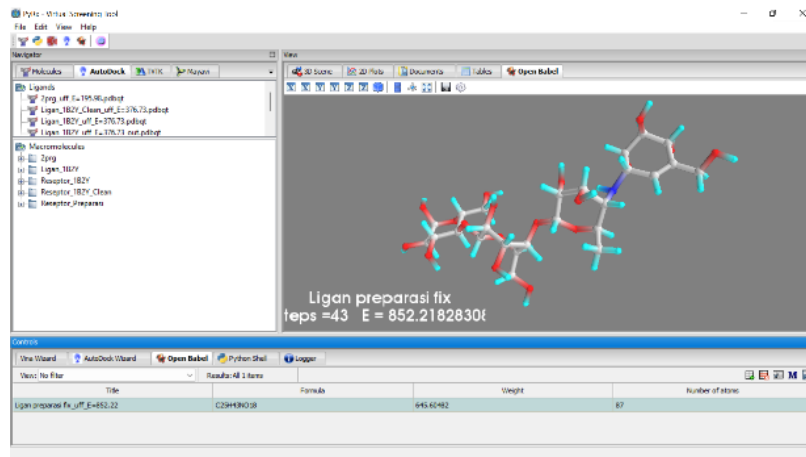
Results

Gambar 3.18 Validasi Struktur Reseptor

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

b) Preparasi Ligan

Melakukan preparasi ligan menggunakan aplikasi PyRx dimulai dengan klik **open babel** → **insert new item** → **unggah berkas ligan** yang sudah dipreparasi sebelumnya → **minimize all** → **save as** dalam format PDB. Proses preparasi ligan dapat dilihat pada Gambar 3.19 di bawah ini.



Gambar 3.19 Preparasi Ligan

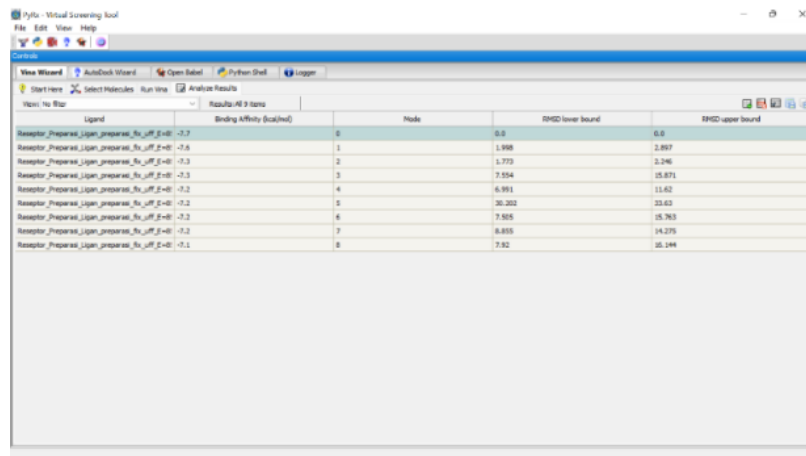
Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.4.6 Tahap Docking Ligan dan Reseptor

Melakukan docking masih menggunakan aplikasi PyRx yang dilanjutkan dari langkah sebelumnya. Klik **vina wizard** → **start** → **pilih ligan** → **pilih reseptor** → **forward** → **maximize vina search space** → **add exhaustiveness** → **run vina** lalu proses docking sedang berlangsung, lalu klik **save as** dalam format pdb.

Ligand	Binding Affinity (kcal/mol)	Mode	RMSD lower bound	RMSD upper bound
Receptor_Preparasi_Ligan_Preparasi_fix_E=852.22	-7.3	0	0.0	0.0
Receptor_Preparasi_Ligan_Preparasi_fix_E=852.22	-7.6	1	0.998	2.887

(a)



The screenshot shows the PyRx Virtual Screening tool interface. The 'Results' tab is active, displaying a table of docking results. The table has columns for 'Ligand', 'Binding Affinity (kcal/mol)', 'Node', 'RMSD lower bound', and 'RMSD upper bound'. The results are sorted by binding affinity, with the most negative value at the top.

Ligand	Binding Affinity (kcal/mol)	Node	RMSD lower bound	RMSD upper bound
Receptor_Prepared_Ligand_Prepared_Receptor_001	-7.7	0	0.0	0.0
Receptor_Prepared_Ligand_Prepared_Receptor_002	-7.6	1	1.988	2.897
Receptor_Prepared_Ligand_Prepared_Receptor_003	-7.3	2	1.773	2.246
Receptor_Prepared_Ligand_Prepared_Receptor_004	-7.3	3	7.554	15.871
Receptor_Prepared_Ligand_Prepared_Receptor_005	-7.2	4	6.951	13.62
Receptor_Prepared_Ligand_Prepared_Receptor_006	-7.2	5	30.282	33.63
Receptor_Prepared_Ligand_Prepared_Receptor_007	-7.2	6	7.855	15.763
Receptor_Prepared_Ligand_Prepared_Receptor_008	-7.2	7	8.855	14.275
Receptor_Prepared_Ligand_Prepared_Receptor_009	-7.1	8	7.82	16.144

(b)

Gambar 3.20 Tahap Docking di PyRx

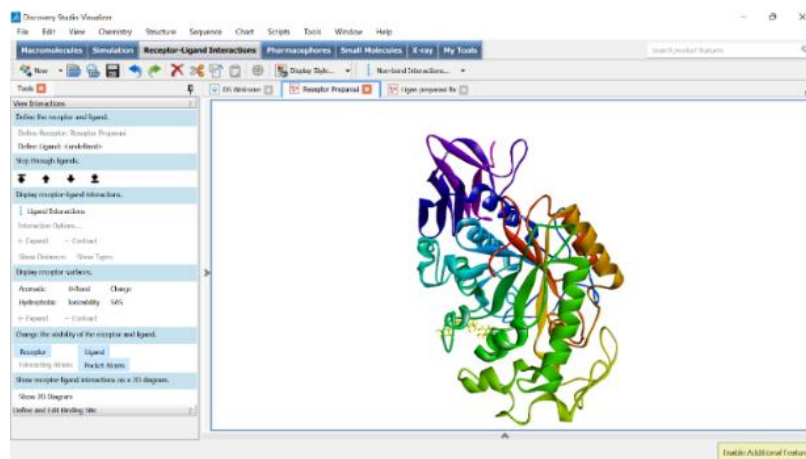
(a) Visual docking reseptor dan ligan dan (b) Hasil docking

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.4.7 Tahap Visualisasi Hasil Docking

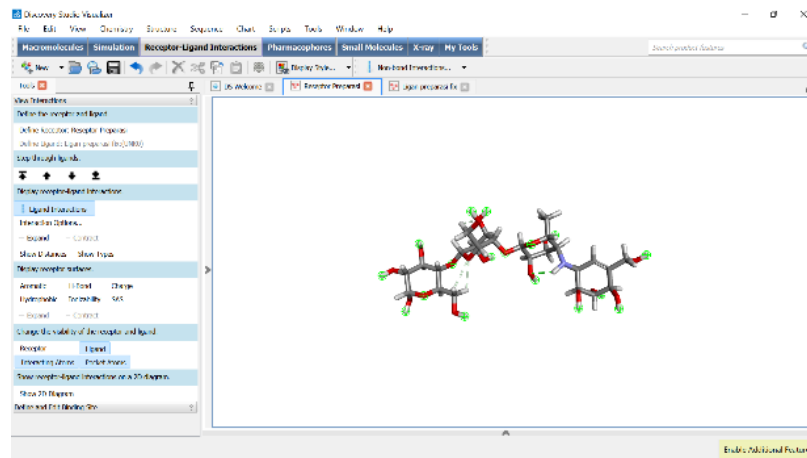
Langkah terakhir dalam tahap docking yaitu visualisasi hasil dengan langkah-langkah sebagai berikut.

- Buka file reseptor dan ligan yang telah dipreparasi, salin ligan dan tempel pada reseptor lalu klik *Define Ligand* seperti pada Gambar 3.21 di bawah ini.

**Gambar 3.21** Tampilan Menu Define Ligand

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

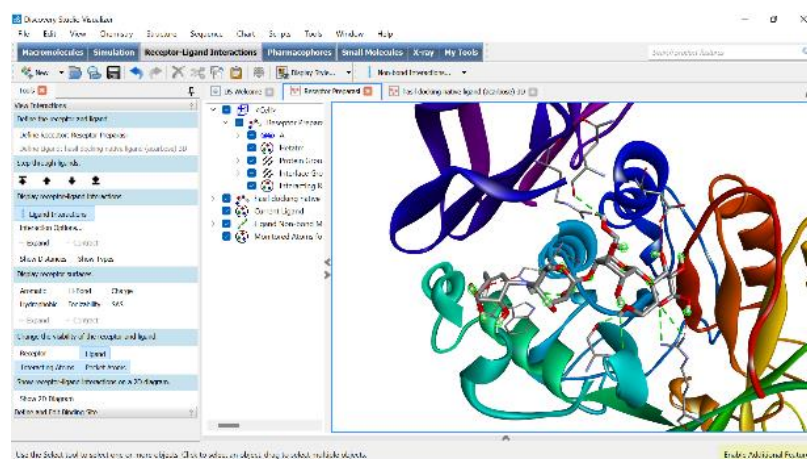
- Klik *Ligand Interactions* pada kolom sebelah kiri seperti pada Gambar 3.22 di bawah ini.



Gambar 3.22 Tampilan *Ligand Interactions*

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

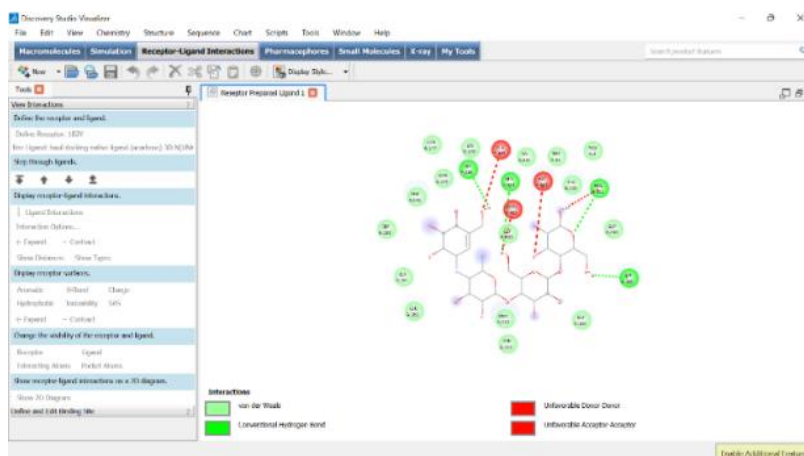
- c) Klik tampilkan reseptor pada kolom sebelah kiri untuk visualisasi secara 3D seperti pada Gambar 3.23 di bawah ini.



Gambar 3.23 Tampilan Visualisasi Hasil Docking 3D

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- d) Klik *Show 2D Diagram* dan tunggu hingga muncul hasil seperti pada Gambar 3.24 di bawah ini.



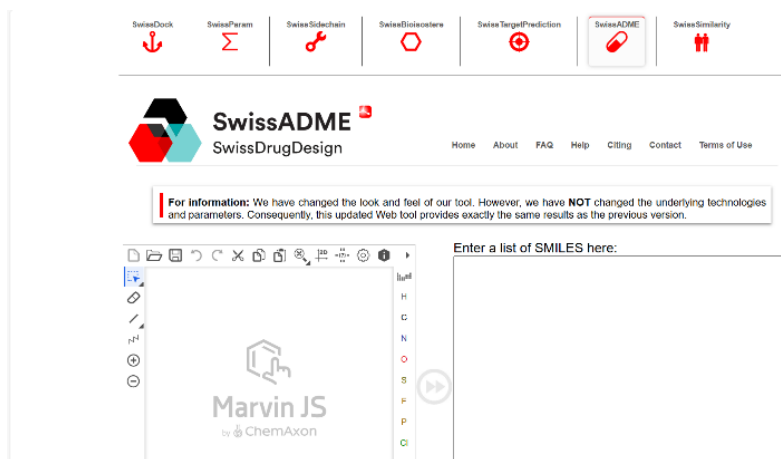
Gambar 3.24 Tampilan Visualisasi Interaksi Residu

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.4.8 Tahap Prediksi Sifat Fisikokimia

Prediksi sifat fisikokimia dapat dilakukan dengan bantuan *website* Lipinski Rule of Five dengan langkah-langkah sebagai berikut.

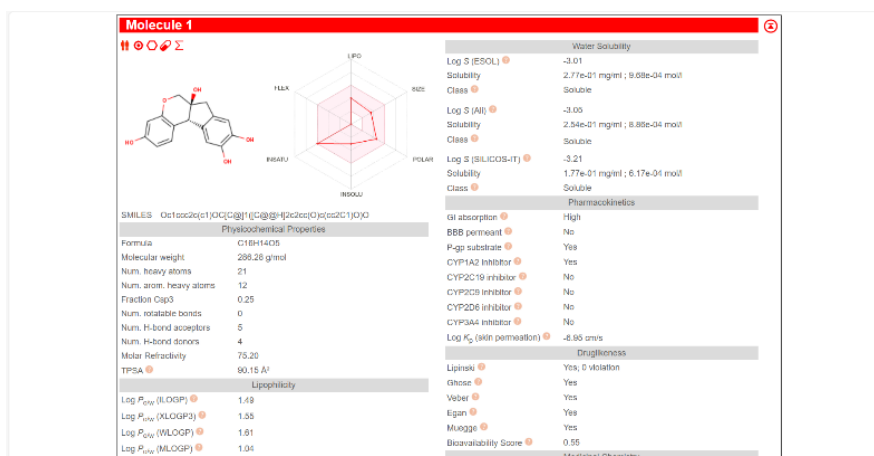
- Akses alamat *website* SwissADME pada url <https://www.swissadme.ch/> lalu unggah berkas ligan yang sudah dipreparasi pada kolom yang tersedia seperti pada Gambar 3.25 di bawah ini.



Gambar 3.25 Tampilan *Website* SwissADME

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- Setelah itu klik *Run*, maka akan muncul hasil yang menunjukkan nilai berdasarkan parameter *Lipinski's rule of five* seperti pada Gambar 3.26 di bawah ini.



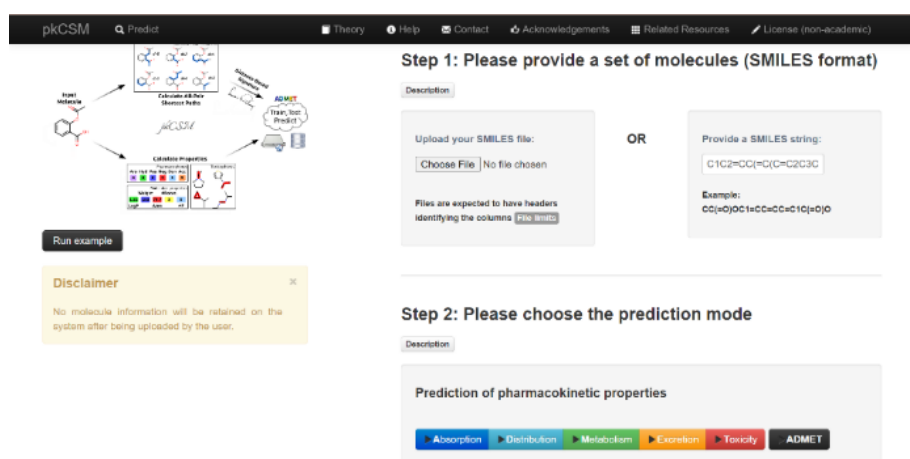
Gambar 3.26 Hasil Prediksi Sifat Fisikokimia

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.4.9 Tahap Prediksi Sifat Farmakokinetik

Prediksi sifat farmakokinetik dari senyawa aktif yang terkandung dalam tanaman secang (*Caesalpinia sappan* L.) dilakukan dengan menggunakan *website* server pkCSM sesuai indikator ADME (*Absorption, Distribution, Metabolism, dan Excretion*) dengan langkah-langkah sebagai berikut.

- Akses *website* pkCSM lalu masukkan kode SMILE dari senyawa yang telah didapatkan sebelumnya seperti pada Gambar 3.27 di bawah ini.



Gambar 3.27 Tampilan *Website* pkCSM

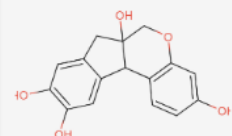
Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- Klik mode *ADME*, lalu tunggu hingga muncul hasil seperti pada Gambar 3.28 di bawah ini.

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

Pharmacokinetic Properties

Molecule Depiction



SMILES

Property	Model Name	Predicted Value	Unit
Absorption	Water solubility	-3.339	Numeric (log mol/L)
Absorption	Caco2 permeability	0.259	Numeric (log Papp in 10 ⁻⁶ cm/s)
Absorption	Intestinal absorption (human)	94.651	Numeric (% Absorbed)
Absorption	Skin Permeability	-2.735	Numeric (log Kp)
Absorption	P-glycoprotein substrate	Yes	Categorical (Yes/No)
Absorption	P-glycoprotein I inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Absorption	P-glycoprotein II inhibitor	No	Categorical (Yes/No)
Distribution	VDss (human)	0.686	Numeric (log L/kg)
Distribution	Fraction unbound (human)	0.127	Numeric (Fu)

Gambar 3.28 Hasil Prediksi Sifat Farmakokinetik

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- c) Scroll ke bawah hingga menemukan *Molecule Properties* pada prediksi sifat fisikokimia seperti pada Gambar 3.29 di bawah ini.

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

SMILES

Molecule properties:

Descriptor	Value
Molecular Weight	286.283
LogP	1.6146
#Rotatable Bonds	0
#Acceptors	5
#Donors	4
Surface Area	120.227

Distribution	VDss (human)	0.686	Numeric (log L/kg)
Distribution	Fraction unbound (human)	0.127	Numeric (Fu)
Distribution	BBB permeability	-0.62	Numeric (log BB)
Distribution	CNS permeability	-2.497	Numeric (log PS)
Metabolism	CYP2D6 substrate	No	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP3A4 substrate	Yes	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP1A2 inhibitor	Yes	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP2C19 inhibitor	Running	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP2C9 inhibitor	Running	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP2D6 inhibitor	Running	Categorical (Yes/No)
Metabolism	CYP3A4 inhibitor	Running	Categorical (Yes/No)
Excretion	Total Clearance	Running	Numeric (log ml/min/kg)
Excretion	Renal OCT2 substrate	Running	Categorical (Yes/No)
Toxicity	AMES toxicity	Running	Categorical (Yes/No)
Toxicity	Max. tolerated dose (human)	Running	Numeric (log mg/kg/day)
Toxicity	HERG I inhibitor	Running	Categorical (Yes/No)

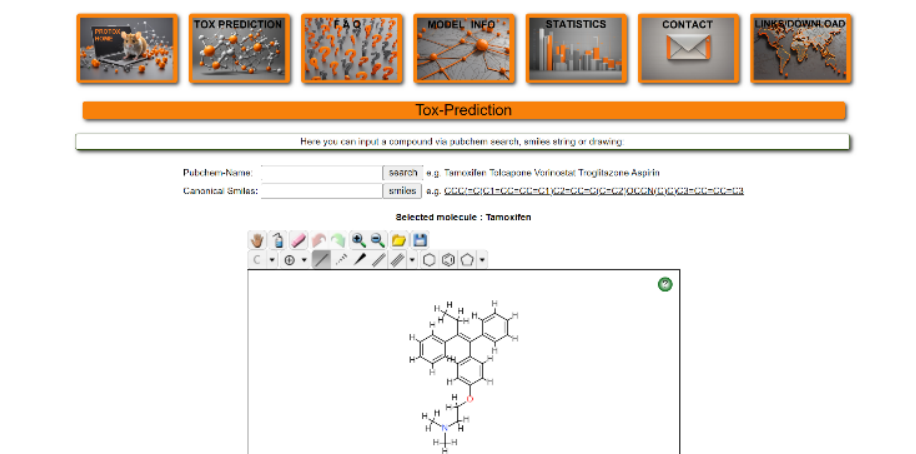
Gambar 3.29 Tampilan *Molecule Properties* di pkCSM

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.4.10 Tahap Prediksi Sifat Toksisitas

Prediksi sifat toksisitas dapat dilakukan dengan bantuan *website* server ProTox *online tool* dengan langkah-langkah sebagai berikut.

- a) Akses alamat *website* ProTox pada url <https://tox.charite.de/protox3/> lalu klik *Tox Prediction* untuk mulai melakukan prediksi sifat toksisitas seperti pada Gambar 3.30 di bawah ini.



Gambar 3.30 Tampilan *Website ProTox*

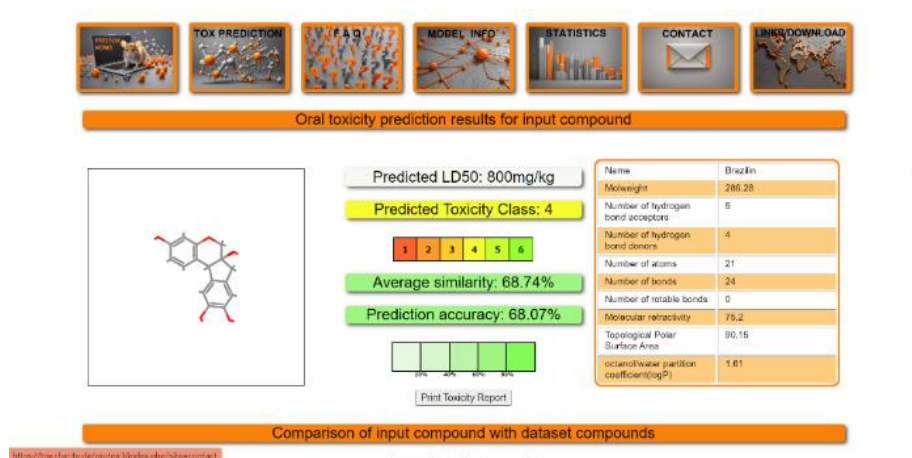
Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- b) Klik *Start Tox-Prediction* untuk mulai melakukan prediksi sifat toksisitas seperti pada Gambar 3.31 di bawah ini.

Gambar 3.31 Tampilan Menu *Tox-Prediction*

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

- c) Setelah itu, maka akan muncul hasil dari prediksi toksisitas senyawa tersebut seperti pada Gambar 3.32 di bawah ini.



Gambar 3.32 Hasil Prediksi Sifat Toksisitas

Sumber: Dokumentasi Peneliti, 2025

3.5 Teknik Pengumpulan Data

Teknik pengumpulan data yang dilakukan dalam penelitian ini menggunakan studi dokumentasi yang meliputi studi literatur dari jurnal, artikel ilmiah, hasil penelitian, dan *screening* melalui *website*. Selain itu penelitian ini juga menggunakan studi *in silico* dengan metode *molecular docking* untuk menggambarkan eksperimen yang dilakukan dengan bantuan komputer untuk mengetahui interaksi antara suatu senyawa dengan reseptor yang nantinya dapat divisualisasikan.

3.6 Teknik Analisis Data

Analisis data adalah proses menemukan dan menyusun secara sistematis dari data yang telah diperoleh dari hasil penelitian dengan mengklasifikasikan data tersebut ke dalam beberapa kategori lalu menarik kesimpulannya sehingga mudah dipahami (Sugiyono, 2017). Adapun analisis data yang dilakukan diawali dengan data hasil studi pendahuluan dan studi literatur yang digunakan oleh peneliti untuk menentukan fokus penelitian.

Afinitas senyawa aktif dari tanaman secang (*Caesalpinia sappan* L.) terhadap reseptor target enzim α -amilase (PDB ID 1B2Y) diukur berdasarkan perbandingan energi afinitas, RMSD (*Root Mean Square Deviation*), dan interaksi ligan dengan protein targetnya. Analisis data prediksi sifat fisikokimia

menggunakan 5 parameter (*Lipinski's rule of five*) yang terdiri atas berat massa molekul (BM) <500 Da, logaritma koefisien partisi oktanol/ait (LogP) <5, *hydrogen bond donor* (HBD) <5, dan *hydrogen bond acceptor* (HBA) <10 (Shofi, 2021). Langkah ini dilakukan dengan menggunakan bantuan *website* server online yaitu pkCSM. Analisis data hasil prediksi sifat farmakokinetik dilakukan secara deskriptif dengan mendeskripsikan nilai senyawa aktif pada web pkCSM sesuai indikator ADME (*Absorption, Distribution, Metabolism, dan Excretion*). Analisis data untuk mengukur tingkat toksisitas dilakukan dengan bantuan *website* server ProTox *online tool* dengan dilihat dari nilai LD₅₀ kemudian data yang dihasilkan dianalisis secara deskriptif.

Teknik analisis data pada penelitian ini dilakukan dengan tiga langkah yang sesuai dengan teknik analisis data pada penelitian kualitatif, yaitu:

1) Reduksi Data

Reduksi data merupakan proses penyaringan, pemfokusan, dan penyederhanaan dari semua jenis informasi yang menjadi pendukung data penelitian yang diperoleh selama proses penelitian berlangsung (Zulfirman, 2022). Dalam penelitian ini, peneliti memilih data dari beberapa jurnal penelitian untuk kemudian disaring dan dipilih berdasarkan data-data yang sesuai dengan kebutuhan peneliti.

2) Penyajian Data

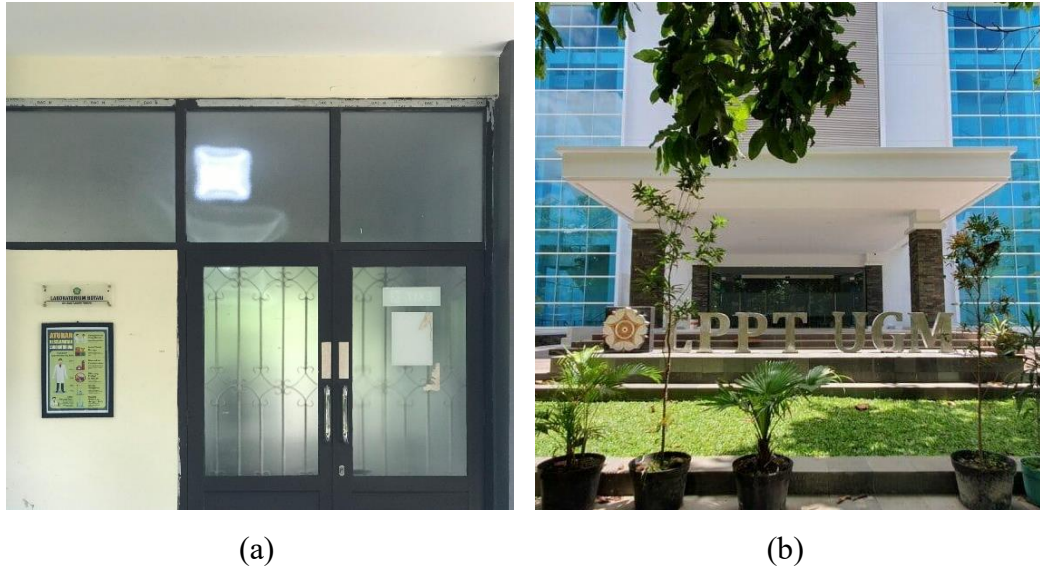
Penyajian data merupakan proses penyusunan informasi yang akan memberikan kemungkinan adanya penarikan kesimpulan berdasarkan data yang telah diperoleh (Zulfirman, 2022). Penyajian data yang dilakukan oleh peneliti berupa penjelasan deskriptif dan disajikan dalam bentuk tabel.

3) Penarikan Kesimpulan

Penarikan kesimpulan menjadi proses akhir dari langkah-langkah yang dilakukan dalam analisis data kualitatif dan data yang disimpulkan diambil dari hasil analisis yang dilakukan pada saat penelitian (Zulfirman, 2022). Penarikan kesimpulan yang dilakukan oleh peneliti yaitu menyimpulkan hasil dari penyajian data yang sudah dilakukan.

3.7 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan di Laboratorium Botani Universitas Siliwangi dan Laboratorium Penelitian dan Pengujian Terpadu Universitas Gadjah Mada yang ditunjukkan pada gambar 3.33. Adapun rincian waktu pelaksanaan penelitian dapat dilihat pada tabel 3.3 di bawah ini.



Gambar 3.33 Tempat Penelitian

(a) Laboratorium Botani Universitas Siliwangi dan (b) Laboratorium Penelitian dan Pengujian Terpadu Universitas Gadjah Mada

Sumber: (a) Dokumentasi Penulis dan (b) *Google*

