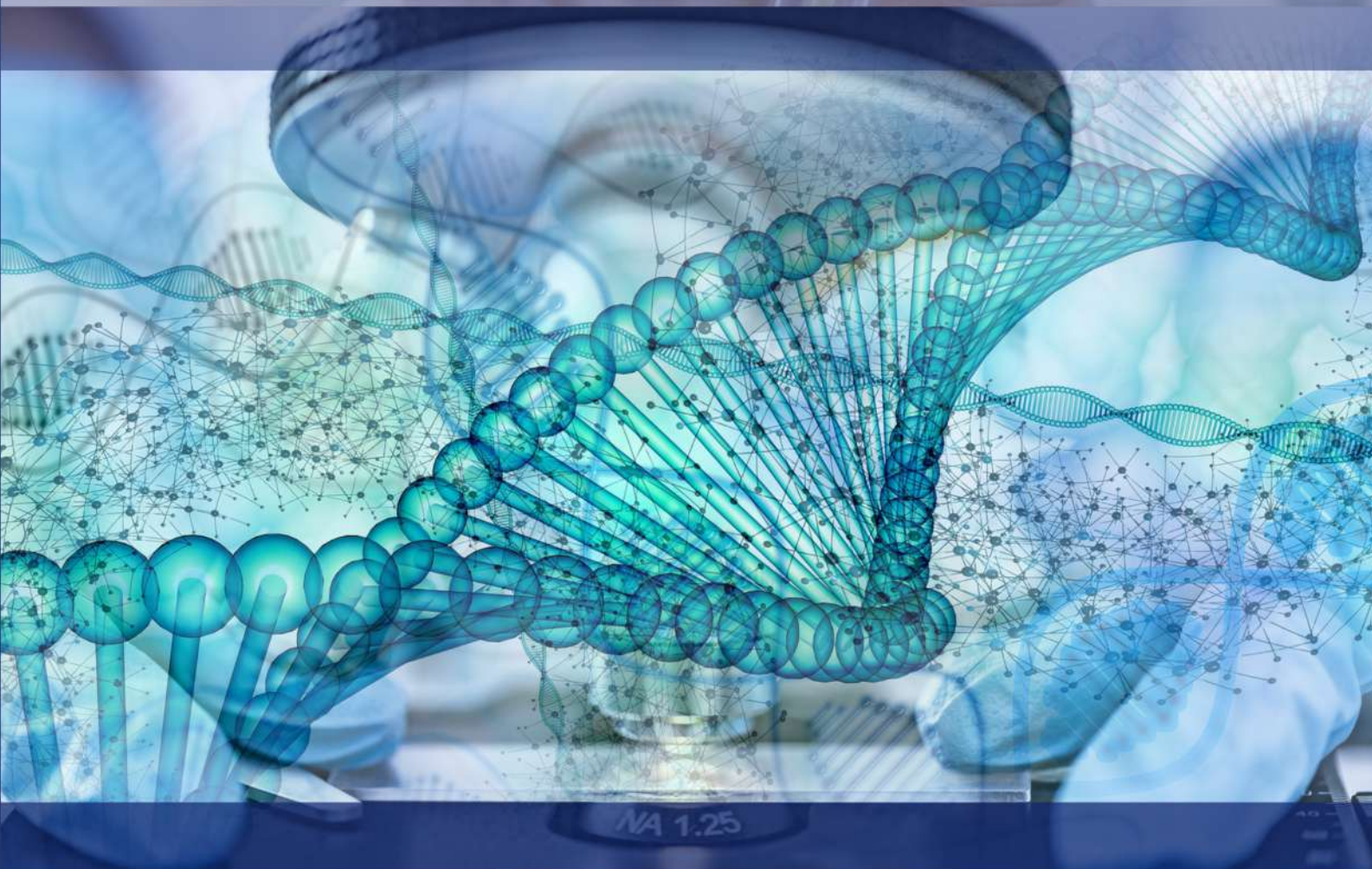




PROSIDING SEMINAR NASIONAL FARMASI



*THE FUTURE OF PHARMACY
AND HEALTH TECHNOLOGY
IN DEGENERATIVE AND TROPICAL DISEASE*

PROSIDING SEMINAR NASIONAL FARMASI:

*“The Future of Pharmacy and Health Technology
in Degenerative and Tropical Disease*

10 Desember 2022
Fakultas Farmasi
Universitas Sanata Dharma
Yogyakarta, Indonesia



Sanata Dharma University Press

**PROSIDING SEMINAR NASIONAL FARMASI:
“The Future of Pharmacy and Health Technology
in Degenerative and Tropical Disease”**

Copyright © 2022 Fakultas Farmasi - Universitas Sanata Dharma, Yogyakarta

KOORDINATOR DEWAN EDITOR

Dr. Florentinus Dika Octa Riswanto

DEWAN EDITOR DAN REVIEWER

Prof. Dr. apt. Enade Perdana Istyastono

Dr. apt. Yosef Wijoyo

Dr. apt. Phebe Hendra

dr. Fenty

Dr. apt. Dewi Setyaningsih

Dr. apt. Sri Hartati Yuliani

apt. C.M. Ratna Rini Nastiti, Ph.D

Dr. apt. Christine Patramurti

Dr. apt. Dita Maria Virginia

apt. Dina Christin Ayuning Putri, M.Sc

apt. Michael Raharja Gani, M.Farm.

KEPANITIAAN

Pengarah dan penanggung jawab:

Dr. apt. Dewi Setyaningsih

Ketua Panitia:

apt. Dina Christin Ayuning Putri, M.Sc.

Sekretaris:

apt. Agustina Setiawati, Ph.D

Bendahara:

apt. Phebe Hendra, Ph.D

Sie. Acara:

apt. Zita Dhirani Pramono, M.Clin. Pharm

Sie. Media:

apt. Michael Raharja Gani, M.Farm.

Sie. Ilmiah:

apt. C.M. Ratna Rini Nastiti, Ph.D

Dr. apt. Christine Patramurti

Dr. apt. Dita Maria Virginia

BUKU ELEKTRONIK (e-BOOK)

ISBN: 978-623-6103-98-2 (PDF)

EAN: 9-786236-103982

SAMPUL & LAYOUT AKHIR BUKU

Thomas

Cetakan Pertama, Januari 2023

xii+376 hlm.; 21x27,9 Cm.

DITERBITKAN OLEH



SANATA DHARMA UNIVERSITY PRESS

Lantai 1 Gedung Perpustakaan USD

Jl. Affandi (Gejayan) Mrican, Yogyakarta 55281

Telp. (0274) 513301, 515253; Ext. 51513; Fax (0274)

562383

Website: www.sdupress.usd.ac.id

e-Mail: publisher@usd.ac.id

INSTITUSI PENDUKUNG & KERJA SAMA

Fakultas Farmasi

Universitas Sanata Dharma Yogyakarta

PT Dexa Medica, PT Almega dan CV Dharma Karya Maju
Sejahtera.



Sanata Dharma University Press anggota

APPTI

(Afiliasi Penerbit Perguruan Tinggi Indonesia)

No. Anggota APPTI: 003.028.1.03.2018

Hak Cipta Dilindungi Undang-Undang.

Dilarang memperbanyak karya tulis ini dalam bentuk dan dengan cara apa pun, termasuk fotokopi,
tanpa izin tertulis dari penerbit.

PENGANTAR

Masa pandemi *COVID-19* yang lalu, membuat seluruh lapisan masyarakat memanfaatkan berbagai teknologi yang ada di berbagai sektor. Sektor pemerintahan, pendidikan, budaya, ekonomi, bahkan kesehatan menjalankan rutinitasnya dengan bantuan teknologi. Berbagai kepentingan administrasi, komunikasi, bahkan kebutuhan hidup sehari-hari memanfaatkan aplikasi maupun media dan teknologi yang ada.

Perkembangan teknologi yang semakin pesat dapat dimanfaatkan untuk membantu penyelesaian masalah-masalah. Di bidang kesehatan, penyakit tropis dan degeneratif menjadi perhatian khusus karena prevalensinya yang tinggi di Indonesia. Penyakit Demam Berdarah Dengue (DBD) merupakan salah satu penyakit tropis yang masih menjadi masalah kesehatan dan ancaman serius di sejumlah wilayah di Indonesia. Kementerian Kesehatan mencatat di tahun 2022, jumlah kumulatif kasus Dengue di Indonesia sampai dengan Minggu ke-22 dilaporkan 45.387 kasus. Sementara jumlah kematian akibat DBD mencapai 432 kasus. Penyakit degeneratif juga menyumbang permasalahan kesehatan yang besar di Indonesia. Pada RISKESDAS 2018 bahwa penyakit jantung, diabetes, stroke, dan gagal ginjal menjadi beberapa penyakit degeneratif yang dipantau di Indonesia.

Penyelesaian untuk masalah penyakit tropis dan degeneratif di Indonesia dapat ditingkatkan dengan memanfaatkan teknologi yang ada. Pemanfaatan teknologi dapat berupa publikasi dan promosi kesehatan melalui media yang jauh lebih luas, penggunaan perangkat lunak maupun keras yang dapat membantu memantau kondisi pasien, monitoring dan evaluasi penggunaan obat, serta alat-alat diagnosis yang lebih efisien, efektif, dan akurat.

Saat ini, *COVID-19* yang belum dinyatakan berakhir oleh *WHO* telah mengubah berbagai tatanan social dan situasi ekonomi masyarakat luas yang berdampak pada issue-issue kesehatan global. Saat pandemi kita mengalami ketidakpastian efektifitas pengobatan, kelangkaan obat dan alat kesehatan, dan efektivitas layanan kesehatan yang semakin diperparah dengan mutase virus yang terus terjadi. Kebutuhan pergeseran layanan kesehatan menjadi layanan kesehatan yang cepat, tertata dan mudah diakses menjadi tinggi.

Belajar dari pandemi *COVID-19*, apoteker sebagai bagian tenaga kesehatan dituntut untuk merespon cepat dan akurat atas kemungkinan hadirnya wabah penyakit di masa depan. Apoteker dituntut berperan aktif pada kondisi-kondisi darurat dalam memberikan pertolongan kepada masyarakat. Berbagai kemungkinan wabah yang bisa terjadi anatara lain wabah yang timbul secara alamiah maupun wabah non alamiah. Penguasaan teknologi kesehatan menjadi kebutuhan untuk pengelolaan issue-issue kesehatan global agar peran apoteker dimasa depan dapat diandalkan pada kondisi darurat dan wabah penyakit.

Upaya pemberantasan penyakit tropis dan degeneratif serta penyakit penyakit lain yang mewabah memerlukan peran penting para tenaga kesehatan, termasuk di bidang farmasi. Banyak teknologi yang bisa dikembangkan dan diupayakan untuk memecahkan permasalahan penyakit tersebut. Seluruh tenaga kesehatan dituntut untuk selalu memperbarui ilmu yang dimilikinya. Seminar nasional dengan tema “*The Future of Pharmacy and Health Technology in Degenerative and Tropical Disease*” menjadi salah satu wadah bagi tenaga kesehatan, ilmuwan, dan juga masyarakat yang ingin meningkatkan wawasan dan mengembangkan diri.

Pada akhirnya, kami berharap agar kegiatan seminar beserta presentasi hasil penelitian oleh para presenter dapat bermanfaat bagi semua pihak. Pemikiran-pemikiran yang ada di sini dapat dimanfaatkan untuk perkembangan dunia kesehatan serta peentuan kebijakan di kemudian hari. Akhir kata, kami berharap semoga kegiatan ini dapat terselenggara kembali. Terima kasih.

Panitia

SAMBUTAN KETUA PANITIA

Yang terhormat:

Direktur Jenderal Kefarmasian dan Alat Kesehatan

Kepala Dinas Kesehatan Daerah Istimewa Yogyakarta

Kepala Balai Besar POM Daerah Istimewa Yogyakarta

Head of Corporate Relations PT Etana Biotechnologies Indonesia

Rektor Universitas Sanata Dharma beserta jajarannya

Dekan Fakultas Farmasi Universitas Sanata Dharma beserta jajarannya

Ketua Palfasadha

Seluruh narasumber, tamu undangan dan peserta yang berbahagia

Assalamu'alaikum Warahmatullahi Wabarakatuh, Shalom, Salam Sejahtera,

Om Swastiastu, Namu Buddhaya, Salam kebajikan

Segala puji dan syukur pada Tuhan Yang Maha Esa yang telah memberikan karunia yang tak terhingga, sehingga panitia Seminar Nasional Fakultas Farmasi Universitas Sanata Dharma dapat melaksanakan kegiatan ini dengan baik. Seminar Nasional yang dilaksanakan pada 10 Desember 2022 ini menghadirkan tema “*The Future of Pharmacy and Health Technology in Degenerative and Tropical Disease*”. Kegiatan seminar ini dilatarbelakangi oleh masa pandemi yang baru saja berlalu dan meningkatnya jumlah penderita penyakit tropis dan degeneratif.

Kegiatan seminar ini menghadirkan beberapa narasumber yaitu Dr. apt. Dra. L. Rizka Andalucia, M. Farm MARS yang akan membawakan topik tentang upaya penyelesaian masalah penyakit tropis dan degeneratif di Indonesia. Setelah itu, akan dilanjutkan materi tentang *The Future of Self Monitoring Blood Glucose to Increase Patient Quality of Life* yang akan dibawakan oleh Mohamad Salahuddin S.T.,M.M. Selanjutnya, Prof. apt. Enade Istyastono, Ph.D. dan dr. Ahmad Hamim Sadewa Ph. D. akan membawakan materi di simposium terpisah dengan topik masing-masing yaitu Eksplorasi Bahan Alam Indonesia sebagai Obat Masa Depan di era Big Data dan Kecerdasan Artifisial dan Etika penelitian di bidang kesehatan.

Kegiatan ini juga memberikan kesempatan bagi para peneliti dan akademisi untuk memaparkan hasil penelitian dan pemikiran berkaitan dengan berbagai upaya untuk mengatasi penyakit degeneratif maupun tropis, mulai dari hulu (pembuatan obat) hingga hilir (uji efektifitas, fenomena, profil persepan, dll). Total terdapat 56 presentasi poster yang akan disajikan dalam seminar kali ini. Peserta presenter juga menuliskan hasil pemikirannya di dalam prosiding. Adanya prosiding ini diharapkan dapat meningkatkan wawasan pembaca. Pemakalah yang berkontribusi dalam kegiatan seminar dan mengirimkan makalah berasal dari berbagai institusi di seluruh Indonesia. Kami mengharapkan prosiding ini menjadi salah satu referensi penting terkait dengan upaya mengatasi penyakit tropis dan degeneratif di Indonesia.

Panitia mengucapkan banyak terima kasih bagi seluruh pihak, khususnya narasumber dalam kegiatan seminar ini. Selain itu kami ucapkan terima kasih pula kepada Rektorat USD, Dekanat FF USD, Seluruh panitia dan tentunya pihak sponsor yaitu PT Dexa Medika, PT Almega dan CV Dharma Karya Maju Sejahtera.

Akhir kata kami berharap semoga acara ini bermanfaat bagi seluruh peserta dan bagi perkembangan pengetahuan di Indonesia. Kami juga mohon maaf apabila masih ada kekurangan di dalam pelaksanaan seminar ini. Terima kasih, salam *E-QCC*

Yogyakarta, 10 Desember 2022

Ketua Panitia

apt. Dina Christin Ayuning Putri, M.Sc.

SAMBUTAN DEKAN FAKULTAS FARMASI UNIVERSITAS SANATA DHARMA

Yang kami hormati,

Direktur Jenderal Kefarmasian dan Alat Kesehatan (Farmalkes) Kementerian Kesehatan RI

PT Global Urban Esensial

Kepala Dinas Kesehatan DIY

Kepala Balai Besar POM DIY

Ketua PD IAI DIY

Head of Corporate Relations PT Etana Biotechnologies Indonesia

Wakil Rektor I USD

Ketua Palfasadha

Assalamu'alaikum Warahmatullahi Wabarakatuh, Shalom, Salam Sejahtera

Om Swastiastu, Namu Buddhaya, Salam kebajikan

Puji dan syukur kita panjatkan ke hadirat Tuhan Yang Maha Kuasa, atas berkatnya Seminar Nasional “*The Future of Pharmacist and Health Technology in Degenerative and Tropical Disease*” dapat terlaksana.

Tema ini dirumuskan untuk merespon dampak pandemi *COVID-19*. Semesta telah mengajar kita pengalaman berharga melalui pandemi *COVID-19*. Kita mengingat bahwa di awal pandemi tidak dapat diketahuinya seberapa banyak pasien yang membutuhkan perawatan rumah sakit dan perawatan/pengobatan manakah yang efektif, sekaligus kondisi terbatasnya *supply* obat-obatan dan alat kesehatan. Lebih jauh, pandemi ini mengajar kita mengenai suatu penyakit yang bermutasi cepat yang tentu semakin manambahkan ketidakpastian pada kesejahteraan umat manusia. Kita juga belajar bahwa serangan virus corona dapat berakibat fatal pada beberapa masyarakat yang menderita penyakit kronis.

Pandemi *COVID-19* telah mempengaruhi kebijakan pelayanan kesehatan, penggunaan obat-obatan, *supply-chain* obat, manufaktur obat dan tentunya profesi apoteker pada tahun-tahun mendatang. Belajar dari situasi pandemi, apoteker perlu selalu terus-menerus mengupayakan diri menjadi *long-life learner* (pembelajar sepanjang hayat) untuk membuat terobosan agar siap berperan dalam kondisi darurat di masa depan dalam menghadapi berbagai wabah ataupun bencana.

Tantangan pandemi COVID 19 menjadikan transformasi digital menjadi hal yang tak terhindarkan. Apoteker memberikan kontribusi yang vital sebagai tenaga kesehatan dan terbuka peluang bagi peran apoteker dalam berbagai pelayanan kesehatan masyarakat yang semakin luas, dengan peralihan ke dunia digital, membuat perlunya apoteker menguasai teknologi kesehatan digital dan kecerdasan buatan untuk manajemen obat dan pelayanan kefarmasian yang lebih baik. Inovasi dalam hal terobosan penemuan obat yang efektif, produk-produk kesehatan dan upaya preventif melindungi masyarakat dari penyakit perlu dikuasai.

Kami hari ini merasa istimewa atas berkenannya hadir Ibu Direktur Jenderal Kefarmasian dan Alat Kesehatan (Farmalkes) Kementerian Kesehatan RI, Mohamad Salahuddin ST., M.M., (PT Global Urban Esensial), Bapak dr. Ahmad Hamim Sadewa, Ph.D., dan Prof. apt. Enade Perdana Istyatono, Ph.D dalam acara Seminar Nasional ini. Mohon maaf sebesar-besarnya atas segala kekurangan di dalam pelaksanaan seminar kali ini.

Dekan Fakultas Farmasi Universitas Sanata Dharma

Dr. apt. Dewi Setyaningsih

DAFTAR ISI

PENGANTAR	iii
SAMBUTAN KETUA PANITIA	v
SAMBUTAN DEKAN FAKULTAS FARMASI UNIVERSITAS SANATA DHARMA	vii
DAFTAR ISI	ix
FORMULASI SEDIAAN MASKER <i>GEL PEEL-OFF</i> EKSTRAK MENTIMUN KOMBINASI EKSTRAK BUAH LEMON DENGAN VARIASI KONSENTRASI PVA DAN HPMC	1
Dina Christin Ayuning Putri, Merry Permatasari, Nico Ade Putra, Julius Andrye Lesmana, Julius Wahyu Nugroho Adi Saputra	
FORMULASI SEDIAAN UNGUENTA <i>LIP SCRUB</i> MINYAK DAUN JARAK (<i>Ricinus communis</i> L.) DAN MINYAK KELAPA MURNI (<i>Virgin Coconut Oil</i>)	12
Agatha Princessa Filomena Borromeu, Anastasia Prajwalita Ayuningtyas, Asteria Widiantari, Febby Tesalonica, Putri Claudia Andani, Dina Christin Ayuning Putri	
OPTIMASI FORMULA SEDIAAN EMULSI <i>LOTION</i> ANTI NYAMUK MINYAK CENGKEH (<i>Syzygium aromaticum</i> L.)	21
Nikita Rahmadiva, Agata Dyah Ayu Putri, Felisha Lu, I Dewa Ayu Ratih Arta Mevia, Diah Puji Astuti, Dina Christin Ayuning Putri	
FORMULASI SEDIAAN LIPSTIK DENGAN EKSTRAK KULIT BUAH NAGA MERAH (<i>Hylocereus polyrhizus</i>)	31
Epala Try Saputri Sijabat, Jesica Siburian, Alfina Putri, Virginando Kevin Bon, Clodya Gabrielle Christina, Dina Christin Ayuning Putri	
PENINGKATAN PROFIL DISOLUSI PADA KURKUMIN MENGGUNAKAN APLIKASI METODE DISPERSI PADAT (<i>KNEADING METHOD</i>)	42
Very Kurniawan, Dewi Setyaningsih	
ORMULASI “CYLACRUM” SERUM ASAM SALISILAT SEBAGAI SERUM KULIT BERJERAWAT DENGAN EFEK MELEMBABKAN MENGGUNAKAN TEKNOLOGI NANOEMULSI	47
Sebastian Vito Pujo Prakoso, Raden Rara Anna Dewi C. M., Angella Devy N. M., Yuvati Vidhaya D., Dina Christin Ayuning P.	
FORMULASI “CIBO” TABLET ORAL PENINGKAT IMUN TUBUH BAHAN EKSTRAK RIMPANG KUNYIT (<i>Curcuma domestica</i> Val) DENGAN METODE DESAIN FAKTORIAL	57
I Putu Rahadi Wismantara, Agnes Alvorian Afra Erlambang, Decthrintan Geraldine, Gilbert Gamaliel Valentino, Yanita Yomberlin Sinta Maria Barangan, Nyoman Bayu Wisnu Kencana, Christofori Maria Ratna Rini Nastiti	
FORMULASI ”ALOGEL” UNTUK PELEMBAB KULIT BAHAN ALAM LIDAH BUAYA (<i>Aloe Vera</i>) DENGAN METODE DESAIN FAKTORIAL	65
Muhammad Aradhana, Gabswinney Eldin Mundi Kalebu, Melisa Putri, Ribka Theananda Pambayun, Rosalia Evita Sari, Christoforia Maria Ratna Rini Nastiti	

PENETAPAN KADAR FENOLIK TOTAL DAN AKTIVITAS ANTIOKSIDAN EKSTRAK ETANOL DAN INFUSA DAUN SIDAGURI (<i>Sida rhombifolia</i> L.) DENGAN METODE <i>1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl</i> (DPPH)	176
Simforosa Nuria Jegabun, Erna Tri Wulandari, Yohanes Dwiatmaka	
UJI VITAMIN C DAN AKTIVITAS SENYAWA AKTIF ANTIOKSIDAN PADA SARI BUAH NAMNAM (<i>Cynometra cauliflora</i> L) ASAL KALIMANTAN SELATAN	184
Nafila, Nurbidayah, Nurul Amalia	
OPTIMASI FORMULA SEDIAAN GEL EKSTRAK BUAH DELIMA MERAH MENGGUNAKAN SIMPLEX LATTICE DESIGN	193
Carolyn Vivian Maura, Agatha Budi Susiana Lestari	
HUBUNGAN POLIFARMASI DENGAN POTENSI DAN TINGKAT KEPARAHAN INTERAKSI OBAT PADA RESEP ANTIDIABETES MELLITUS	201
Nugroho Wibisono, Sri Herlina, Mazrifa Sengaji	
PENGARUH VARIASI GENETIK <i>STK11 rs2075604</i> TERHADAP RISIKO PENYAKIT KARDIOVASKULAR PADA PASIEN DIABETES MELITUS TIPE II YANG MENGONSUMSI METFORMIN DI KABUPATEN SLEMAN	216
Paulina Nadya Feranti Peppy Lorenza, Dita Maria Virginia	
PENGARUH PELAYANAN KIE TEHADAP KEPUASAN PASIEN DI INSTALASI FARMASI PUSKESMAS KALASAN SLEMAN YOGYAKARTA	233
Marisha Idang, Putu Dyana Christasani	
PENGARUH VARIASI GENETIK <i>STK11 RS2075604</i> TERHADAP EFEKTIVITAS TERAPI KOMBINASI METFORMIN+GLIMEPIRID PADA PASIEN DIABETES MELITUS TIPE 2	238
Matea Nirmala Defi, Dita Maria Virginia	
PENGGUNAAN ANGIOTENSIN CONVERTING ENZYME INHIBITORS/ANGIOTENSIN II RECEPTOR BLOCKERS TIDAK MENINGKATKAN DERAJAT KEPARAHAN DAN MORTALITAS PASIEN COVID-19	251
Agatha Kania Ugahari Dyatmika, Fenty	
STUDI INTERAKSI OBAT ANTIDIABETIK ORAL DENGAN ANTIHIPERTENSI PADA PASIEN DIABETES MELITUS TIPE 2 DI PUSKESMAS MOPAH MERAUKE	257
Angelicha Stephani Impa Ganggang, Dita Maria Virginia	
HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR-PROPERTI (HKSP) SENYAWA AKTIF TEMU KUNCI (<i>BOESENBERGIA PANDURATA</i>) SEBAGAI PENGHAMBAT ENZIM <i>MAIN PROTEASE (M^{PRO})</i> SARS-CoV-2	268
Anita Puspa Widiyana, Rosario Trijuliamos Manalu, Ani Riani Hasana	
AKTIVITAS ANTIHIPERGLIKEMIK DEKOKTA KULIT BATANG FALOAK PADA MENCIT TERBEBANI GLUKOSA	276
Jeanne Magistra Noverita, Anandha Nabila Prajanaparamita, Michelle Walencia Diantha, Charles Conrad Rambung, Phebe Hendra, Jeffry Julianus	
KTIVITAS ANTIHIPERGLIKEMIK INFUSA KULIT FALOAK PADA MENCIT TERINDUKSI GULA ORAL	283
Michelle Walencia Diantha, Anandha Nabila Prjanaparamita, Jeanne Magistra Noverita, Charles Conrad Rambung, Jeffry Julianus, Phebe Hendra	

HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR-PROPERTI (HKSP) SENYAWA AKTIF TEMU KUNCI (*BOESENBERGIA PANDURATA*) SEBAGAI PENGHAMBAT ENZIM *MAIN PROTEASE (M^{PRO})* SARS-CoV-2

Anita Puspa Widiyana^{1*}, Rosario Trijuliamos Manalu², Ani Riani Hasana³

¹Program Studi Farmasi, Fakultas Kedokteran, Universitas Islam Malang, Jl. Mayjen Haryono No. 193, Kec. Lowokwaru, Kota Malang, Jawa Timur, 65144, Indonesia

²Fakultas Farmasi, Institut Sains Dan Teknologi Nasional, Jl. M Kahfi II, Srengseng Sawah, Kec. Jagakarsa, Kota Jakarta Selatan, D.K.I. Jakarta, 12630, Indonesia

³Program Studi Farmasi, Sekolah Tinggi Ilmu Kesehatan Panti Waluya Malang, Jl. Yulius Usman No. 62, Kasin, Kec. Klojen, Kota Malang, Jawa Timur, 65117, Indonesia

ABSTRAK

Hubungan parameter fisikokimia dari 15 senyawa aktif *Boesenbergia pandurata* dalam menghambat enzim *main protease* SARS-CoV-2 diprediksi melalui model Hubungan Kuantitatif Struktur-Properti (HKSP). Semua senyawa aktif diperoleh dari basis data. Parameter fisikokimia meliputi sifat lipofilik, elektronik dan sterik ditentukan dengan ChemDraw sedangkan prediksi aktivitas diambil dari penelitian sebelumnya. Hubungan kuantitatif dari parameter fisikokimia dan aktivitas dianalisis menggunakan regresi linier berganda dengan SPSS. Persamaan terbaik dipilih berdasarkan nilai r , R^2 , SE, F, dan $.sig$. Persamaan yang diperoleh sebanyak 41 persamaan dan persamaan terbaiknya yaitu $\Delta G = (-0,476 \cdot \log P) - (0,022 \cdot E_{LUMO}) - (0,019 \cdot BM) - 1,121$ ($n = 15$; $r = 0,972$; $R^2 = 0,946$; $SE = 0,281$; $F = 63,712$; $.sig = 0,000$). Parameter yang diprediksi paling berpengaruh secara simultan dan signifikan terhadap aktivitas dalam menghambat enzim *main protease* SARS-CoV-2 adalah Log P, E_{LUMO} dan berat molekul.

Kata kunci: HKSP; SARS-CoV-2; *Boesenbergia pandurata*

I. PENDAHULUAN

Boesenbergia pandurata atau yang biasa disebut temu kunci adalah salah satu tanaman obat yang banyak tumbuh di Indonesia. Temu kunci memiliki berbagai manfaat diantaranya anti alergi, antibakteri, anti inflamasi, anti ulcer, anti virus dengue, dan anti herpes (Patel et al., 2016; Bahadur Gurung et al., 2022). Aktivitas temu kunci terutama pada bagian akar dihubungkan dengan kandungan senyawa aktif seperti flavonoid, minyak esensial, dan polifenol (Bahadur Gurung et al., 2022). Pemanfaatan dari kandungan rimpang temu kunci baru-baru ini telah diteliti aktivitasnya secara *in silico* sebagai anti-SARS-Cov-2 oleh Gurung dkk (2022). Sebanyak 15 senyawa sudah diuji nilai energi bebas ikatannya (ΔG). Nilai prediksi aktivitas (ΔG) tidak terlepas dari pengaruh parameter fisikokimia dari senyawa uji. Untuk mengetahui bagaimana pengaruh dari parameter fisikokimia terhadap prediksi aktivitas melalui model Hubungan Kuantitatif Struktur-Properti (HKSP) sebagai salah satu tujuan penelitian ini.

Model HKSP sebagai salah satu teknik aplikasi kemoinformatik (Rakhimbekova et al., 2020; Sato et al., 2021). Properti dari senyawa kimia dikuantifikasi dalam bentuk matematika dengan bantuan komputer,

* Penulis korespondensi: Anita Puspa Widiyana, email: anitapuspaw@unisma.ac.id

yang tujuannya untuk memprediksi data baru, merasionalisasi fenomena yang terjadi, atau keduanya (Rakhimbekova et al., 2020; Zeolites et al., 2020; Zaki et al., 2021). Penggunaan model HKSP yang semakin berkembang memiliki keunggulan diantaranya waktu analisis cepat, efektif, efisien, murah, dan menghasilkan nilai-nilai eksperimental yang hilang (Wang & Chen, 2020; Masand et al., 2020; Gantzer et al., 2020). Properti senyawa kimia pada model HKSP diklasifikasikan menjadi 3 parameter yaitu lipofilik, sterik, dan elektronik. Sifat lipofilik berhubungan dengan penembusan membran biologis, sifat elektronik berhubungan dengan kekuatan ikatan obat-reseptor, dan sifat sterik berhubungan dengan keserasian interaksi obat-reseptor (Siswandono, 2016). Peranan ketiga parameter tersebut sebagai dasar dalam pemilihan properti senyawa aktif pada penelitian ini.

Pemodelan HKSP sendiri terbagi menjadi dua model yaitu model regresi dan model klasifikasi. Model klasifikasi memiliki keakuratan yang terbatas dibanding model regresi (Wang & Chen, 2020). Oleh sebab itu, pada penelitian ini diutamakan penggunaan model regresi yaitu *Multiple Linier Regression* (MLR). Model regresi MLR digunakan untuk mengetahui hubungan antara parameter fisikokimia dan prediksi aktivitas anti-SARS-Cov-2 serta jenis pengaruhnya.

II. METODE

A. Alat dan Bahan

Perangkat keras dan lunak pada penelitian antara lain komputer Fujitsu AH544 dengan spesifikasi Intel®Core™ i7-4702MQ, @ 2,20GHz, Nvidia® GeForce, sistem operasi Windows 10 versi 64-bit, RAM 16 GB, program ChemBio Draw 2D dan 3D ver. 20, dan SPSS ver. 26. Bahan yang digunakan yaitu 15 senyawa aktif dari temu kunci yang diperoleh dari kumpulan data penelitian Bahadur Gurung dkk. (2022).

B. Metode

B.1 Persiapan Senyawa Aktif

Senyawa aktif sebanyak 15 diperoleh dari kumpulan data penelitian Bahadur Gurung dkk. (2022). Semua senyawa dimasukkan ke dalam program ChemDraw 2D untuk membuat struktur 2 dimensi (2D). Struktur 2D dikopi ke program ChemDraw 3D dan diminimalkan energinya dengan metode MMFF94. Senyawa 3D disimpan dalam format .sdf.

B.2 Penentuan Parameter Fisikokimia

Parameter fisikokimia terdiri dari sifat lipofilik ($\log P$ dan $\log S$), elektronik (E_{tot} dan E_{LUMO}), dan sterik (MR dan BM). Nilai dari $\log P$, $\log S$, MR dan BM dianalisis dengan program ChemDraw 2D, sedangkan E_{tot} dan E_{LUMO} dianalisis dengan program ChemDraw 3D.

B.3 Penentuan Energi Bebas Ikatan (ΔG)

Energi bebas ikatan (ΔG) ditentukan dengan mengambil kumpulan data dari penelitian Bahadur Gurung dkk (2022).

B.4 Analisis Data

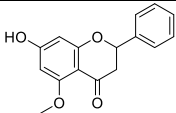
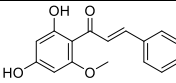
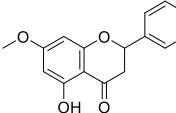
Hubungan secara kuantitatif dari nilai parameter fisikokimia dengan prediksi aktivitas dianalisis dengan *Multiple Linier Regression* (MLR) menggunakan SPSS. Persamaan terbaik dipilih berdasarkan nilai r , R^2 , SE, F, dan sig (Shanmukha et al., 2020; Toropov, 2020).

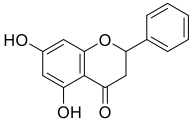
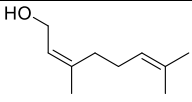
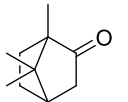
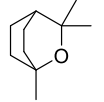
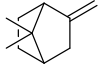
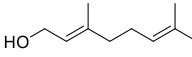
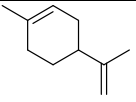
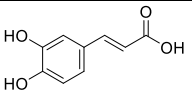
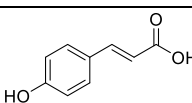
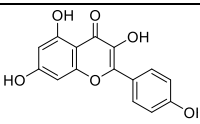
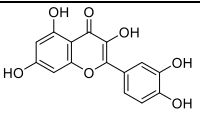
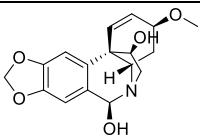
III. HASIL DAN DISKUSI

Hasil penentuan parameter fisikokimia meliputi parameter lipofilik, elektronik dan sterik dianalisis menggunakan ChemDraw (Widiyana, 2021). Parameter lipofilik terdiri dari log P dan log S, elektronik terdiri dari E_{tot} dan E_{LUMO} , serta sterik terdiri dari MR dan BM dapat dilihat pada Tabel 1.

Kelarutan obat dalam air ditentukan dengan nilai log P dan log S. Kedua nilai tersebut dapat berpengaruh terhadap permeabilitas obat di dalam membran biologis dan bioavailabilitas obat oral (Caron et al., 2018; Bergström & Larsson, 2018; Protti et al., 2021). Pada Tabel 1 diperoleh nilai log P sebesar 0,35 - 3,01 dan nilai log S sebesar -3,968 sampai -1,846. Sebanyak 3 senyawa diantaranya kaemferol, kuersetin dan hemantidin memiliki nilai log P < 1 yang berarti lipofilisitasnya rendah dan 12 senyawa lainnya memiliki nilai log P sebesar 1-4 yang berarti lipofilitas menengah. Selain itu, semua senyawa telah memenuhi aturan 5 Lipinski dan nilainya positif yang berarti semua senyawa diprediksi menunjukkan permeabilitas di dalam membran biologis yg baik, dapat berikatan dengan protein plasma, dan ada toleransi dengan lambung. Nilai log S menunjukkan jumlah zat terlarut dalam larutan jernih. Semakin besar nilai log S maka jumlah zat terlarut semakin besar. Hasil nilai log S sebesar -3,968 sampai -1,846. Nilai log P dan log S berbanding terbalik, semakin tinggi lipofilitas (log P) suatu senyawa maka jumlah senyawa yang terlarut (log S) semakin rendah. Nilai energi total yang diperoleh sebesar -23,6869 sampai 166,6850 kkal/mol. Senyawa yang memiliki E_{tot} paling kecil dibanding yang lainnya yaitu asam kafein sebesar -23,6869 kkal/mol. Semakin kecil nilai E_{tot} maka semakin kecil energi yang dibutuhkan agar suatu senyawa dalam kondisi stabil. Nilai energi LUMO dari semua senyawa sebesar -5,448 sampai 20,346 eV yang menunjukkan bahwa senyawa mampu menerima elektron. Senyawa yang memiliki E_{LUMO} paling rendah yaitu cardamonin sebesar -5,448 eV. Semakin rendah nilai E_{LUMO} maka semakin baik menjadi akseptor elektron dan sebaliknya. Oleh sebab itu cardamonin sebagai akseptor elektron paling baik dibanding senyawa yang lainnya. Nilai MR yang diperoleh dari semua senyawa sebesar 43,74-85,59 [$\text{cm}^3\text{mol}^{-1}$] dan sudah sesuai dengan aturan Ghose sebesar 40-140 [$\text{cm}^3\text{mol}^{-1}$]. Sebagai parameter sterik, nilai MR berhubungan dengan volume dari beberapa atom dan memiliki korelasi dengan gaya dispersif London pada proses interaksi antara obat dan reseptor (Bărbulescu et al., 2021). Berat molekul dari semua senyawa adalah 136,238 - 317,341 Da. Kelima belas senyawa memiliki $\text{BM} \leq 500$ Da dan menurut aturan 5 Lipinski yang berarti semua senyawa mudah melewati membran sel (Caron et al., 2018).

Tabel 1: Nilai parameter fisikokimia

No.	Nama Senyawa	Struktur	Lipofilik		Elektronik		Sterik		ΔG
			Log P	Log S	E_{tot}	E_{LUMO}	MR	BM	
1.	Alpinetin		2,28	-3,433	54,0117	-3,391	75,29	270,284	-7,51
2.	Cardamonin		2,68	-3,968	67,0544	-5,448	78,30	270,284	-7,09
3.	Pinostrobin		2,28	-3,433	46,2101	-3,453	75,29	270,284	-7,18

No.	Nama Senyawa	Struktur	Lipofilik		Elektronik		Sterik		ΔG
			Log P	Log S	Etot	E_{LUMO}	MR	BM	
4.	Pinocembrin		2,02	-3,306	33,1458	-3,433	69,86	256,257	-7,21
5.	Nerol		2,49	-1,888	166,6850	0,934	51,64	154,253	-5,39
6.	Camphor		2,92	-2,033	45,5633	-1,385	44,37	152,237	-5,32
7.	Sineol		1,86	-2,301	38,3935	20,346	45,68	154,253	-5,41
8.	Alpha-Fenchen		2,95	-2,909	48,7502	1,077	43,74	136,238	-5,28
9.	Geraniol		2,49	-1,888	18,4455	1,071	51,64	154,253	-5,27
10.	Limonen		3,01	-2,588	23,9536	0,655	46,86	136,238	-4,83
11.	Asam kafein		1,15	-2,032	-23,6869	-4,946	46,48	180,159	-4,92
12.	Asam kumarik		1,54	-1,846	-22,0212	-4,937	44,67	164,160	-4,59
13.	Kaemferol		0,74	-3,552	39,8337	-4,834	74,70	286,239	-6,91
14.	Kuersetin		0,35	-3,151	37,4872	-4,877	76,51	302,238	-7,07
15.	Hemantidin		0,91	-2,081	75,3326	-0,000	85,59	317,341	-6,99

Keterangan:

Log P: Logaritma partisi oktanol/air; Log S: Logaritma kelarutan (dalam air); E_{tot} = Energi total (kkal/mol); E_{LUMO} = Energi *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (eV); RM = Refraksi Molar (cm^3/mol); BM = Berat Molekul (Da); ΔG = energi bebas ikatan (kkal/mol)

Penentuan model HKSP digunakan SPSS untuk pengujian MLR. Sebanyak 41 persamaan diperoleh dari MLR dan hasilnya dapat dilihat pada Tabel 2. Pemilihan model HKSP yang terbaik dinilai dengan

harga r , R^2 , SE, F, dan $.sig$ (Shanmukha et al., 2020; Toropov, 2020). Model HKSP yang terbaik dinilai dari harga r mendekati 1, R^2 mendekati 100%, nilai $F_{hitung} > F_{tabel}$ dan $.sig < 0,05$. Berdasarkan hal tersebut diperoleh satu persamaan terbaik dari model HKSP yaitu:

$$\Delta G = (-0,476 * \log P) - (0,022 * E_{LUMO}) - (0,019 * BM) - 1,121$$

$$(n = 15; r = 0,972; R^2 = 0,946; SE = 0,281; F = 63,712; .sig = 0,000)$$

Persamaan terpilih mempunyai harga r_{hitung} sebesar 0,972 yang lebih besar dibanding r_{tabel} sebesar 0,514 ($\alpha = 0,05$), nilai r_{hitung} mendekati 1 dan yang paling baik dibanding persamaan lainnya. Hal tersebut berarti tingkat hubungan antara parameter fisikokimia dengan prediksi aktivitas (ΔG) sangat tinggi. Harga R^2 sebesar 0,946 yang berarti 94,6% dari nilai prediksi aktivitas (ΔG) dapat dijelaskan hubungannya dengan parameter fisikokimia. Kesalahan standar estimasi (SE) paling kecil dibanding persamaan lainnya sebesar 0,281 dan cenderung ke nilai 0 yang berarti memiliki kesalahan yang kecil dan kemampuan prediksi yang tinggi. Nilai F paling besar sebesar 63,712 dan lebih besar dibanding F_{tabel} ($F_{tabel} = 3,490, \alpha = 0,05$). Hal tersebut berarti hubungan yang diperoleh adalah benar dan bukan karena kejadian kebetulan. Nilai signifikansi ($.sig$) paling kecil sebesar 0,000 ($< 0,05$) yang berarti parameter fisikokimia memiliki pengaruh secara simultan dan signifikan terhadap nilai prediksi aktivitas (ΔG). Berdasarkan persamaan HKSP yang terbaik maka dapat diprediksi parameter fisikokimia yang paling berpengaruh secara simultan dan signifikan terhadap aktivitas dalam menghambat enzim *main protease* SARS-CoV-2 adalah $\log P$, E_{LUMO} dan berat molekul. Tanda negatif dari ketiga parameter fisikokimia menunjukkan bahwa semakin kecil nilai $\log P$, E_{LUMO} dan berat molekul maka semakin besar aktivitasnya dalam menghambat enzim *main protease* SARS-CoV-2.

Tabel 2: Persamaan HKSA antara parameter fisikokimia dengan aktivitas (ΔG)

No.	Persamaan	r	R ²	SE	F	.sig
Persamaan 1 parameter fisikokimia						
1.	$\Delta G = 0,383 \log P - 6,822$	0,308	0,095	1,054	1,360	0,264
2.	$\Delta G = 1,120 \log S - 3,046$	0,769	0,591	0,709	18,765	0,001
3.	$\Delta G = -0,003 E_{tot} - 5,195$	0,682	0,465	0,810	11,307	0,005
4.	$\Delta G = 0,052 E_{LUMO} - 0,6021$	0,312	0,097	1,053	1,400	0,258
5.	$\Delta G = -0,064 MR - 2,187$	0,943	0,889	0,369	104,061	0,000
6.	$\Delta G = -0,014 BM - 2,993$	0,919	0,844	0,437	70,469	0,000
Persamaan 2 parameter fisikokimia						
7.	$\Delta G = 1,112 \log S + 0,365 \log P - 3,790$	0,823	0,677	0,656	12,558	0,001
8.	$\Delta G = -0,003 E_{tot} + 0,508 \log P - 6,129$	0,793	0,629	0,702	10,165	0,003
9.	$\Delta G = 0,045 E_{LUMO} + 0,326 \log P - 6,672$	0,405	0,164	1,055	1,175	0,342
10.	$\Delta G = -0,068 MR - 0,162 \log P - 1,632$	0,950	0,903	0,360	55,618	0,000
11.	$\Delta G = -0,018 BM - 0,456 \log P - 1,366$	0,965	0,931	0,302	81,078	0,000
12.	$\Delta G = -0,001 E_{tot} + 0,824 \log S - 3,363$	0,832	0,692	0,639	13,499	0,001
13.	$\Delta G = 0,011 E_{LUMO} + 1,089 \log S - 3,122$	0,771	0,595	0,734	8,800	0,004
14.	$\Delta G = -0,052 MR + 0,388 \log S - 1,857$	0,964	0,929	0,306	79,068	0,000
15.	$\Delta G = -0,001 BM + 0,467 \log S - 2,403$	0,952	0,907	0,351	58,461	0,000
16.	$\Delta G = 0,065 E_{LUMO} - 0,003 E_{tot} - 5,086$	0,785	0,616	0,715	9,617	0,003
17.	$\Delta G = -0,058 MR - 0,01 E_{tot} - 2,381$	0,950	0,902	0,360	55,468	0,000
18.	$\Delta G = -0,012 BM - 0,001 E_{tot} - 3,125$	0,948	0,889	0,366	53,351	0,000
19.	$\Delta G = -0,066 MR - 0,011 E_{LUMO} - 2,088$	0,945	0,893	0,377	49,968	0,000
20.	$\Delta G = -0,015 BM - 0,016 E_{LUMO} - 2,869$	0,923	0,852	0,444	34,502	0,000
21.	$\Delta G = -0,062 MR + 0,000 BM - 2,201$	0,943	0,889	0,384	48,040	0,000
Persamaan 3 parameter fisikokimia						
22.	$\Delta G = 0,447 \log P + 0,756 \log S - 0,002 E_{tot} - 4,336$	0,904	0,818	0,514	16,437	0,000
23.	$\Delta G = 0,363 \log P + 1,107 \log S + 0,002 E_{LUMO} - 3,799$	0,823	0,677	0,685	7,679	0,005
24.	$\Delta G = 0,354 \log S - 0,062 \log P - 0,055 MR - 1,674$	0,965	0,931	0,316	49,602	0,000

No.	Persamaan	r	R ²	SE	F	.sig
25.	$\Delta G = 0,233 \text{ Log S} - 0,348 \text{ Log P} - 0,015 \text{ BM} - 1,456$	0,970	0,942	0,290	59,388	0,000
26.	$\Delta G = 0,442 \text{ Log P} - 0,003 \text{ E}_{\text{tot}} + 0,056 \text{ E}_{\text{LUMO}} - 5,913$	0,858	0,736	0,618	10,234	0,002
27.	$\Delta G = -0,103 \text{ Log P} + 0,000 \text{ Log P} - 0,062 \text{ MR} - 1,954$	0,952	0,906	0,369	35,353	0,000
28.	$\Delta G = -0,383 \text{ Log P} + 0,000 \text{ E}_{\text{tot}} - 0,017 \text{ BM} - 1,665$	0,966	0,934	0,309	51,903	0,000
29.	$\Delta G = -0,162 \text{ Log P} - 0,011 \text{ E}_{\text{LUMO}} - 0,070 \text{ MR} - 1,534$	0,952	0,906	0,368	35,533	0,000
30.	$\Delta G = -0,476 \text{ Log P} - 0,022 \text{ E}_{\text{LUMO}} - 0,019 \text{ BM} - 1,121$	0,972	0,946	0,281	63,712	0,000
31.	$\Delta G = 0,007 \text{ MR} - 0,485 \text{ Log P} - 0,020 \text{ BM} - 1,355$	0,965	0,931	0,315	49,761	0,000
32.	$\Delta G = 0,653 \text{ Log S} - 0,002 \text{ E}_{\text{tot}} + 0,036 \text{ E}_{\text{LUMO}} - 3,682$	0,853	0,728	0,628	9,816	0,002
33.	$\Delta G = 0,356 \text{ Log S} + 0,000 \text{ E}_{\text{tot}} - 0,049 \text{ MR} - 2,011$	0,967	0,935	0,307	51,708	0,000
34.	$\Delta G = 0,366 \text{ Log S} - 0,001 \text{ E}_{\text{tot}} - 0,010 \text{ BM} - 2,628$	0,966	0,934	0,310	51,848	0,000
35.	$\Delta G = 0,405 \text{ Log S} - 0,015 \text{ E}_{\text{LUMO}} - 0,054 \text{ MR} - 1,708$	0,968	0,936	0,303	54,067	0,000
36.	$\Delta G = 0,486 \text{ Log S} - 0,021 \text{ E}_{\text{LUMO}} - 0,012 \text{ BM} - 2,222$	0,959	0,919	0,342	41,659	0,000
37.	$\Delta G = 0,391 \text{ Log S} - 0,046 \text{ MR} - 0,001 \text{ BM} - 1,912$	0,964	0,930	0,319	48,609	0,000
38.	$\Delta G = -0,001 \text{ E}_{\text{tot}} - 0,001 \text{ E}_{\text{LUMO}} - 0,058 \text{ MR} - 2,366$	0,950	0,902	0,376	33,908	0,000
39.	$\Delta G = 0,003 \text{ E}_{\text{LUMO}} - 0,001 \text{ E}_{\text{tot}} - 0,012 \text{ BM} - 3,153$	0,948	0,899	0,382	32,686	0,000
40.	$\Delta G = -0,001 \text{ E}_{\text{tot}} - 0,033 \text{ MR} - 0,005 \text{ BM} - 2,667$	0,952	0,907	0,367	35,791	0,000
41.	$\Delta G = -0,012 \text{ E}_{\text{LUMO}} - 0,060 \text{ MR} - 0,001 \text{ BM} - 2,136$	0,945	0,893	0,393	30,646	0,000

Keterangan:

Log P: Logaritma partisi oktanol/air; Log S: Logaritma kelarutan (dalam air); E_{tot} = Energi total (kkal/mol); E_{LUMO} = Energi *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (eV); RM = Refraksi Molar (cm^3/mol); BM = Berat Molekul (Da); ΔG = energi bebas ikatan (kkal/mol)

IV. KESIMPULAN

Persamaan HKSP yang terbaik yaitu $\Delta G = (-0,476 \cdot \log P) - (0,022 \cdot E_{\text{LUMO}}) - (0,019 \cdot \text{BM}) - 1,121$ ($n = 15$; $r = 0,972$; $R^2 = 0,946$; $SE = 0,281$; $F = 63,712$; $.sig = 0,000$). Parameter yang diprediksi paling berpengaruh secara simultan dan signifikan terhadap aktivitas dalam menghambat enzim *main protease* SARS-CoV-2 adalah Log P, E_{LUMO} , dan berat molekul.

V. UCAPAN TERIMA KASIH

Terima kasih kami ucapkan kepada Prof. Dr. Siswandono M.S., Apt. yang telah memfasilitasi program Chemdraw 2D dan 3D ver. 20 serta SPSS ver. 26.

DAFTAR PUSTAKA

- Bahadur Gurung, A., Ajmal Ali, M., Al-Hemaid, F., El-Zaidy, M., & Lee, J. (2022). In silico analyses of major active constituents of fingerroot (*Boesenbergia rotunda*) unveils inhibitory activities against SARS-CoV-2 main protease enzyme. *Saudi Journal of Biological Sciences*, 29(1), 65–74. <https://doi.org/10.1016/j.sjbs.2021.11.053>
- Bărbulescu, A., Barbe, L., & Dumitriu, C. Ş. (2021). Computer-Aided Classification of New Psychoactive Substances. *Journal of Chemistry*, 2021(December 2016). <https://doi.org/10.1155/2021/4816970>
- Bergström, C. A. S., & Larsson, P. (2018). Computational prediction of drug solubility in water-based systems: Qualitative and quantitative approaches used in the current drug discovery and development setting. *International Journal of Pharmaceutics*, 540(1–2), 185–193. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2018.01.044>
- Caron, G., Vallaro, M., & Ermondi, G. (2018). Log P as a tool in intramolecular hydrogen bond considerations. *Drug Discovery Today: Technologies*, 27(xx), 65–70. <https://doi.org/10.1016/j.ddtec.2018.03.001>
- Gantzer, P., Creton, B., & Nieto-Draghi, C. (2020). Inverse-QSPR for de novo Design: A Review. *Molecular Informatics*, 39(4). <https://doi.org/10.1002/minf.201900087>
- La Kilo, A., Aman, L. O., Sabihi, I., & La Kilo, J. (2019). Studi Potensi Pirazolin Tersubstitusi 1-N dari Thiosemicarbazone sebagai Agen Antiamuba melalui Uji In Silico. *Indo. J. Chem. Res.*, 7(1), 9–24. <https://doi.org/10.30598/ijcr.2019.7-akr>
- Masand, V. H., Akasapu, S., Gandhi, A., Rastija, V., & Patil, M. K. (2020). Structure features of peptide-type SARS-CoV main protease inhibitors: Quantitative structure activity relationship study. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 206 (October), 104172. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2020.104172>
- Naef, R. (2015). A generally applicable computer algorithm based on the group additivity method for the calculation of seven molecular descriptors: Heat of combustion, LogPo/w, LogS, refractivity, polarizability, toxicity and LogBB of organic compounds; scope and limits of applicability. *Molecules*, 20(10), 18279–18351. <https://doi.org/10.3390/molecules201018279>
- Patel, N. K., Jaiswal, G., & Bhutani, K. K. (2016). A review on biological sources, chemistry and pharmacological activities of pinostrobin. *Natural Product Research*, 30(18), 2017–2027. <https://doi.org/10.1080/14786419.2015.1107556>
- Protti, Í. F., Rodrigues, D. R., Fonseca, S. K., Alves, R. J., de Oliveira, R. B., & Maltarollo, V. G. (2021). Do Drug-likeness Rules Apply to Oral Prodrugs? *ChemMedChem*, 16(9), 1446–1456. <https://doi.org/10.1002/cmdc.202000805>
- Rakhimbekova, A., Madzhidov, T. I., Nugmanov, R. I., Gimadiev, T. R., Baskin, I. I., & Varnek, A. (2020). Comprehensive analysis of applicability domains of QSPR models for chemical reactions. *International Journal of Molecular Sciences*, 21(15), 1–20. <https://doi.org/10.3390/ijms21155542>
- Sato, A., Miyao, T., Jasial, S., & Funatsu, K. (2021). Comparing predictive ability of QSAR/QSPR models using 2D and 3D molecular representations. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 35(2), 179–193. <https://doi.org/10.1007/s10822-020-00361-7>

- Shanmukha, M. C., Basavarajappa, N. S., Shilpa, K. C., & Usha, A. (2020). Degree-based topological indices on anticancer drugs with QSPR analysis. *Heliyon*, 6(6), e04235. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04235>
- Siswandono, 2016. Kimia Medisinal. Edisi ke-1. Surabaya: Airlangga University Press, hal.255-346.
- Toropov, A. A. (2020). *QSPR / QSAR: State-of-Art, Weirdness, the Future. i.*
- Wang, Y., & Chen, X. (2020). QSPR model for Caco-2 cell permeability prediction using a combination of HQPSO and dual-RBF neural network. *RSC Advances*, 10(70), 42938–42952. <https://doi.org/10.1039/d0ra08209k>
- Widiyana, A. P. (2021). Desain Komputasi dari Turunan Senyawa Kuinazolin-4(3H)-on sebagai Inhibitor Siklooksigenase-2 (COX-2). *Jfsp*, 7(2), 2579–4558. <http://journal.ummg.ac.id/index.php/pharmacy>
- Zaki, M. E. A., Al-Hussain, S. A., Masand, V. H., Akasapu, S., Bajaj, S. O., El-Sayed, N. N. E., Ghosh, A., & Lewaa, I. (2021). Identification of anti-sars-cov-2 compounds from food using qsar-based virtual screening, molecular docking, and molecular dynamics simulation analysis. *Pharmaceuticals*, 14(4). <https://doi.org/10.3390/ph14040357>
- Zeolites, H. B. E. A., Elvas-leit, R., Martins, F., Borbinha, L., & Marranita, C. (1959). *molecules Probing Substrate / Catalyst Effects Using QSPR Analysis on Friedel-Crafts Acylation Reactions over.*
- Zhong, J. F., Rauf, A., Naeem, M., Rahman, J., & Aslam, A. (2021). Quantitative structure-property relationships (QSPR) of valency based topological indices with Covid-19 drugs and application. *Arabian Journal of Chemistry*, 14(7), 103240. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2021.103240>

PROSIDING SEMINAR NASIONAL FARMASI

*“THE FUTURE OF PHARMACY
AND HEALTH TECHNOLOGY
IN DEGENERATIVE AND TROPICAL DISEASE*

Perkembangan teknologi yang semakin pesat dapat dimanfaatkan untuk membantu penyelesaian masalah-masalah. Di bidang kesehatan, penyakit tropis dan degeneratif menjadi perhatian khusus karena prevalensinya yang tinggi di Indonesia. Penyakit Demam Berdarah Dengue (DBD) merupakan salah satu penyakit tropis yang masih menjadi masalah kesehatan dan ancaman serius di sejumlah wilayah di Indonesia. Kementerian Kesehatan mencatat di tahun 2022, jumlah kumulatif kasus Dengue di Indonesia sampai dengan Minggu ke-22 dilaporkan 45.387 kasus. Sementara jumlah kematian akibat DBD mencapai 432 kasus. Penyakit degeneratif juga menyumbang permasalahan kesehatan yang besar di Indonesia. Pada RISKESDAS 2018 bahwa penyakit jantung, diabetes, stroke, dan gagal ginjal menjadi beberapa penyakit degeneratif yang dipantau di Indonesia.

Penyelesaian untuk masalah penyakit tropis dan degeneratif di Indonesia dapat ditingkatkan dengan memanfaatkan teknologi yang ada. Pemanfaatan teknologi dapat berupa publikasi dan promosi kesehatan melalui media yang jauh lebih luas, penggunaan perangkat lunak maupun keras yang dapat membantu memantau kondisi pasien, monitoring dan evaluasi penggunaan obat, serta alat-alat diagnosis yang lebih efisien, efektif, dan akurat. [PENGANTAR]



SANATA DHARMA UNIVERSITY PRESS
Jl. Affandi, (Gejayan) Mrican, Yogyakarta 55281
Phone: (0274)513301; Ext.51513
Web: sdupres.usd.ac.id; E-mail: publisher@usd.ac.id



ISBN 978-623-6103-98-2 (PDF)



9 786236 103982

Farmasi

PROSIDING SEMINAR NASIONAL FARMASI

THE FUTURE OF PHARMACY AND HEALTH TECHNOLOGY IN DEGENERATIVE AND TROPICAL DISEASE

Perkembangan teknologi yang semakin pesat dapat dimanfaatkan untuk membantu penyelesaian masalah-masalah. Di bidang kesehatan, penyakit tropis dan degeneratif menjadi perhatian khusus karena prevalensinya yang tinggi di Indonesia. Penyakit Demam Berdarah Dengue (DBD) merupakan salah satu penyakit tropis yang masih menjadi masalah kesehatan dan ancaman serius di sejumlah wilayah di Indonesia. Kementerian Kesehatan mencatat di tahun 2022, jumlah kumulatif kasus Dengue di Indonesia sampai dengan Minggu ke-22 dilaporkan 45.387 kasus. Sementara jumlah kematian akibat DBD mencapai 432 kasus. Penyakit degeneratif juga menyumbang permasalahan kesehatan yang besar di Indonesia. Pada RISKESDAS 2018 bahwa penyakit jantung, diabetes, stroke, dan gagal ginjal menjadi beberapa penyakit degeneratif yang dipantau di Indonesia.

Penyelesaian untuk masalah penyakit tropis dan degeneratif di Indonesia dapat ditingkatkan dengan memanfaatkan teknologi yang ada. Pemanfaatan teknologi dapat berupa publikasi dan promosi kesehatan melalui media yang jauh lebih luas, penggunaan perangkat lunak maupun keras yang dapat membantu memantau kondisi pasien, monitoring dan evaluasi penggunaan obat, serta alat-alat diagnosis yang lebih efisien, efektif, dan akurat. [PENGANTAR]



SANATA DHARMA UNIVERSITY PRESS
Jl. Affandi, (Gejayan) Mrican, Yogyakarta 55281
Phone: (0274)513301; Ext.51513
Web: sdupres.usd.ac.id; E-mail: publisher@usd.ac.id



ISBN 978-623-6103-98-2 (PDF)



9 786236 103982

Farmasi