



## Analisis Fitokimia Daun Sambung Nyawa Sebagai Kandidat Obat Herbal untuk Terapi Hipertensi Ringan

Nerdy<sup>1</sup>, Nilsya Febrika Zebua<sup>2</sup>, Andre Aditya<sup>3\*</sup>, Dea Amelia Adiatma<sup>4</sup>, Ira Eka Fahira<sup>5</sup>, Miska Raihana<sup>6</sup>, Rijalul Ihsan<sup>7</sup>

<sup>1-7</sup>Universitas Tjut Nyak Dhien Medan, Indonesia

Email: [Andreaditya2006@gmail.com](mailto:Andreaditya2006@gmail.com)<sup>3</sup>, [Dead1635@gmail.com](mailto:Dead1635@gmail.com)<sup>4</sup>, [Ekafahira1@gmail.com](mailto:Ekafahira1@gmail.com)<sup>5</sup>,

[Miskaraihana13@gmail.com](mailto:Miskaraihana13@gmail.com)<sup>6</sup>, [Rijalulihسان19@gmail.com](mailto:Rijalulihسان19@gmail.com)<sup>7</sup>

\*Penulis Korespondensi : [Andreaditya2006@gmail.com](mailto:Andreaditya2006@gmail.com)

**Abstract:** This study aims to analyze the phytochemical profile of Sambung Nyawa (*Gynura procumbens*) leaves as a potential herbal candidate for mild hypertension therapy using *in silico* methods. Plant samples were examined to identify active compounds documented in the PubChem database. The identified compounds were further analyzed using PASS Online to predict their pharmacological activities, ProTox-II to evaluate toxicity levels, and pkCSM to assess ADMET (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity) characteristics. The findings reveal that several bioactive compounds present in Sambung Nyawa leaves demonstrate strong predicted anti-hypertensive activity accompanied by minimal toxicological risk. PASS Online analysis indicates potential mechanisms of action, including vascular receptor modulation and mild diuretic properties that may support blood pressure regulation. ProTox-II classification places most compounds in the low-toxicity category, while pkCSM predictions confirm acceptable bioavailability and favorable pharmacokinetic properties. Overall, these results provide a preliminary scientific foundation for the development of *Gynura procumbens* as an alternative herbal therapy for mild hypertension and support the need for further validation through *in vitro* and *in vivo* experimental studies.

**Keywords:** Active Compounds; Hypertension; *In Silico*; Phytochemistry; Sambung Nyawa.

**Abstrak:** Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis profil fitokimia daun Sambung Nyawa (*Gynura procumbens*) sebagai kandidat herbal potensial untuk terapi hipertensi ringan menggunakan metode *in silico*. Sampel tanaman diperiksa untuk mengidentifikasi senyawa aktif yang tercatat dalam basis data PubChem. Senyawa yang teridentifikasi selanjutnya dianalisis menggunakan PASS Online untuk memprediksi aktivitas farmakologisnya, ProTox-II untuk mengevaluasi tingkat toksisitas, dan pkCSM untuk menilai karakteristik ADMET (Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, dan Toksisitas). Hasil penelitian menunjukkan bahwa beberapa senyawa bioaktif yang terdapat dalam daun Sambung Nyawa menunjukkan aktivitas antihipertensi yang kuat disertai dengan risiko toksikologi minimal. Analisis PASS Online menunjukkan mekanisme kerja potensial, termasuk modulasi reseptor vaskular dan sifat diuretik ringan yang dapat mendukung pengaturan tekanan darah. Klasifikasi ProTox-II menempatkan sebagian besar senyawa dalam kategori toksisitas rendah, sementara prediksi pkCSM mengkonfirmasi bioavailabilitas yang dapat diterima dan sifat farmakokinetik yang menguntungkan. Secara keseluruhan, hasil ini memberikan landasan ilmiah awal untuk pengembangan *Gynura procumbens* sebagai terapi herbal alternatif untuk hipertensi ringan dan mendukung perlunya validasi lebih lanjut melalui studi eksperimental *in vitro* dan *in vivo*.

**Kata kunci:** Fitokimia; Hipertensi; *In Silico*; Sambung Nyawa; Senyawa Aktif.

### 1. PENDAHULUAN

Tanaman *Sambung Nyawa* (*Gynura procumbens*) merupakan salah satu tanaman obat tradisional yang populer di Indonesia, dikenal karena khasiatnya dalam menurunkan tekanan darah dan sebagai antioksidan alami. Daun tanaman ini biasanya dikonsumsi dalam bentuk rebusan atau ekstrak untuk mengatasi hipertensi ringan, menjaga kesehatan jantung, dan meningkatkan daya tahan tubuh. Morfologi daun yang khas berwarna hijau muda, permukaan sedikit kasar, dan bentuk oval memudahkan identifikasi di alam liar maupun budidaya rumah. Kandungan fitokimia utama daun, seperti flavonoid, fenolik, dan saponin, berperan dalam

aktivitas farmakologis tanaman, termasuk efek antihipertensi, antioksidan, dan antibakteri. Penggunaan daun *Sambung Nyawa* secara tradisional telah berlangsung selama bertahun-tahun, sehingga menunjukkan penerimaan masyarakat yang tinggi terhadap terapi herbal ini. Penelitian modern mengonfirmasi efektivitas ekstrak daun dalam menurunkan tekanan darah pada model hewan percobaan, menunjukkan bahwa tanaman ini memiliki potensi sebagai terapi komplementer yang aman dan efektif. Gambar 1 menunjukkan morfologi daun yang menjadi sumber senyawa aktif (Aliya & Arbeta, 2019)



**Gambar 1.** Daun *Sambung Nyawa* (*Gynura procumbens*).

Analisis fitokimia adalah langkah awal yang penting untuk menilai potensi farmakologis daun *Gynura procumbens* karena memungkinkan identifikasi senyawa bioaktif secara sistematis. Dengan menggunakan basis data PubChem, peneliti dapat menelusuri senyawa yang terkandung dan mengetahui struktur kimianya. Pendekatan *in silico*, seperti PASS Online, memungkinkan prediksi aktivitas farmakologis senyawa tanpa uji laboratorium awal. ProTox-II digunakan untuk mengevaluasi toksisitas senyawa, sementara pkCSM memprediksi parameter ADMET (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity), sehingga keamanan dan bioavailabilitas senyawa dapat diprediksi lebih awal. Metode ini menghemat waktu dan biaya penelitian, serta meminimalkan risiko efek samping saat uji lanjut dilakukan. Pendekatan kombinasi antara fitokimia klasik dan analisis *in silico* menjadi strategi efektif untuk menyeleksi kandidat senyawa herbal dengan potensi antihipertensi tinggi, yang dapat dikembangkan menjadi terapi herbal modern berbasis bukti ilmiah. (Andjani et al., 2021)

Senyawa flavonoid, fenolik, dan saponin dalam daun *Gynura procumbens* memiliki mekanisme kerja yang mendukung efek antihipertensi, termasuk diuretik ringan dan modulasi

reseptor vaskular. Profil metabolit tanaman telah dianalisis menggunakan UHPLC-Q Orbitrap HRMS, yang mengidentifikasi lebih dari 30 senyawa aktif dalam daun dan batang tanaman.

Senyawa tersebut berperan dalam menurunkan tekanan darah, menetralkan radikal bebas, dan menjaga kesehatan vaskular. Gambar 2 menampilkan diagram distribusi metabolit senyawa bioaktif sehingga mempermudah visualisasi dan pemahaman terhadap kandungan fitokimia. Penelitian terdahulu menunjukkan bahwa senyawa aktif dalam daun ini memiliki potensi antihipertensi yang signifikan dan dapat dikembangkan sebagai terapi herbal berbasis bukti. Data metabolomik ini menjadi dasar ilmiah bagi pengembangan obat herbal aman dan efektif, serta menjadi acuan untuk penelitian lanjutan terkait mekanisme kerja senyawa aktif (Septaningsih et al., 2022)



**Gambar 2.** Diagram Profil Metabolit Senyawa Aktif Daun *Gynura procumbens*.

Selain efek antihipertensi, daun *Sambung Nyawa* juga memiliki aktivitas antioksidan dan antibakteri yang signifikan. Senyawa fenolik dan flavonoid mampu menurunkan stres oksidatif yang berkontribusi terhadap hipertensi, serta mencegah kerusakan sel akibat radikal bebas. Aktivitas antibakteri daun ini dapat membantu mengatasi infeksi ringan yang sering dialami pasien hipertensi, sehingga menjadi terapi tambahan yang bermanfaat. Studi *in vivo* pada tikus menunjukkan bahwa ekstrak daun mampu menurunkan tekanan darah secara signifikan dan meningkatkan kadar nitric oxide, indikator penting kesehatan vaskular. Temuan ini menegaskan bahwa *Gynura procumbens* memiliki potensi sebagai terapi komplementer yang aman dan efektif, sekaligus memperkuat relevansi pengembangan obat herbal dari tanaman lokal. Keunggulan tanaman ini terletak pada kemampuannya menyediakan terapi

multifungsi yang mendukung kesehatan jantung dan sistem vaskular (Rahimatul Uthia et al., 2020)

Pemanfaatan daun *Sambung Nyawa* secara tradisional di berbagai wilayah Indonesia membuktikan tingkat penerimaan masyarakat yang tinggi terhadap terapi herbal ini. Banyak masyarakat rutin mengonsumsi daun sebagai pencegahan atau penurunan tekanan darah, menunjukkan kepercayaan terhadap efektivitasnya. Literatur review menegaskan bahwa *Gynura procumbens* memiliki aktivitas farmakologis yang luas, mulai dari antihipertensi, antioksidan, hingga efek antihiperurisemia. Pengetahuan ini menegaskan pentingnya analisis fitokimia komprehensif, identifikasi senyawa aktif, dan prediksi toksisitas sebagai dasar ilmiah pengembangan obat herbal. Studi semacam ini juga mendukung integrasi antara praktik tradisional dan penelitian modern, sehingga memastikan keamanan, efektivitas, dan kualitas produk herbal yang dikembangkan (Lado et al., 2021)

Pendekatan *in silico* menjadi strategi populer dalam penelitian obat herbal karena efisiensi waktu, biaya, dan keamanan. Analisis senyawa daun *Gynura procumbens* melalui PASS Online, ProTox-II, dan pkCSM memungkinkan prediksi aktivitas farmakologis, toksisitas, dan bioavailabilitas secara cepat dan akurat. Metode ini mempermudah seleksi senyawa kandidat sebelum uji laboratorium dilakukan, sekaligus mengurangi risiko efek samping yang tidak diinginkan. Data *in silico* menjadi dasar ilmiah dalam pengembangan formulasi obat herbal yang aman, efektif, dan berbasis bukti. Pendekatan ini juga membuka peluang penelitian lanjutan untuk memahami mekanisme kerja senyawa secara lebih mendalam dan memformulasikan terapi herbal modern yang dapat diterima secara luas. (Putri et al., 2024)

Secara keseluruhan, penelitian ini memberikan dasar ilmiah untuk pengembangan *Gynura procumbens* sebagai terapi herbal untuk hipertensi ringan. Melalui analisis fitokimia, identifikasi senyawa aktif via PubChem, prediksi aktivitas farmakologis dengan PASS Online, serta evaluasi toksisitas menggunakan ProTox-II, pendekatan ini menekankan bukti ilmiah untuk obat herbal. Temuan ini dapat digunakan sebagai referensi dalam formulasi obat herbal dan membuka peluang pengujian lebih lanjut secara *in vitro* maupun *in vivo* untuk validasi keamanan dan efektivitas. Dengan demikian, daun *Sambung Nyawa* diharapkan menjadi alternatif terapi hipertensi ringan yang aman, efektif, dan terjangkau, sekaligus menjembatani praktik tradisional dan penelitian modern. (Simamora & Hasibuan, 2021)

## 2. TINJAUAN TEORITIS

Daun *Sambung Nyawa* (*Gynura procumbens*) merupakan tanaman herbal yang banyak digunakan dalam pengobatan tradisional, khususnya untuk mengontrol hipertensi ringan. Senyawa bioaktif utama seperti flavonoid (orientin, quercetin, kaempferol) dan fenolik (chlorogenic acid) memiliki aktivitas antioksidan dan vasodilator yang berperan dalam menurunkan tekanan darah. Analisis fitokimia dan studi *in silico* dengan basis data PubChem, PASS Online, ProTox-II, dan pkCSM memungkinkan penelusuran struktur kimia, prediksi aktivitas farmakologis, toksisitas, dan parameter ADMET. Pendekatan ini memberikan dasar ilmiah untuk pengembangan terapi herbal berbasis daun *Sambung Nyawa* yang aman dan efektif, serta mendukung penelitian lanjutan untuk validasi *in vitro* dan *in vivo*. Selain itu, penelitian terdahulu menunjukkan kombinasi senyawa bioaktif dapat meningkatkan efek sinergis antihipertensi dan antioksidan (Ferdinal et al., 2023).

### **Tanaman *Gynura procumbens* sebagai Obat Herbal**

Tanaman *Sambung Nyawa* (*Gynura procumbens*) dikenal luas di Asia Tenggara sebagai tanaman obat tradisional karena berbagai manfaat kesehatan. Daunnya digunakan dalam pengobatan hipertensi, diabetes, dan penyakit kardiovaskular ringan. Keunggulan tanaman ini terletak pada kandungan senyawa bioaktif yang melimpah, termasuk flavonoid, fenolik, dan saponin, yang telah terbukti berperan dalam modulasi tekanan darah serta pengurangan stres oksidatif. Penggunaan tanaman ini secara tradisional mendukung penelitian modern untuk mengidentifikasi potensi farmakologis dan mekanisme kerja senyawa aktif. Morfologi daun yang khas memudahkan identifikasi tanaman, sehingga menjadi kandidat ideal untuk penelitian fitokimia dan pengembangan terapi herbal berbasis bukti. Pemahaman mengenai karakteristik tanaman ini sangat penting dalam evaluasi efektivitas dan keamanan sebagai obat antihipertensi. (Aliya & Arbeta, 2019)

Selain kemudahan identifikasi, *Gynura procumbens* memiliki sejarah pemanfaatan yang panjang, menunjukkan penerimaan masyarakat terhadap terapi herbal. Daun dapat dikonsumsi sebagai rebusan, ekstrak etanol, atau dikeringkan untuk obat tradisional. Pendekatan ini telah digunakan secara turun-temurun dalam pengobatan hipertensi ringan dan gangguan kardiovaskular. Penelitian modern mendukung efektivitas daun dengan uji laboratorium, memperlihatkan penurunan tekanan darah pada model hewan percobaan. Hal ini menunjukkan bahwa *Sambung Nyawa* tidak hanya sekadar tanaman obat tradisional, tetapi memiliki dasar ilmiah yang dapat dijadikan alternatif terapi komplementer yang aman. Integrasi antara praktik tradisional dan bukti ilmiah memungkinkan pengembangan obat herbal berbasis tanaman lokal dengan validasi fitokimia dan farmakologi. (Andjani et al., 2021)

## Senyawa Bioaktif dan Fitokimia

Senyawa bioaktif dalam daun *Gynura procumbens*, termasuk flavonoid, fenolik, saponin, dan alkaloid, berperan penting dalam aktivitas farmakologis tanaman. Flavonoid berkontribusi pada efek antioksidan dan antihipertensi dengan menurunkan stres oksidatif dan memodulasi vasodilatasi. Fenolik mendukung aktivitas antioksidan dan menjaga kesehatan vaskular. Analisis fitokimia menggunakan teknik kromatografi dan spektrometri modern memungkinkan identifikasi senyawa secara akurat, sehingga dapat menghubungkan komponen kimia dengan efek terapeutik. Informasi ini menjadi dasar dalam pengembangan terapi herbal, karena memungkinkan pemilihan senyawa aktif yang berpotensi tinggi untuk uji lanjutan secara *in vitro* maupun *in vivo*. Penelitian fitokimia juga mendukung validasi ilmiah terhadap penggunaan daun *Sambung Nyawa* secara tradisional. (Ferdinal et al., 2023)

Profil metabolit daun *Gynura procumbens* sangat kompleks dan terdiri dari puluhan senyawa yang berinteraksi dalam memberikan efek farmakologis. Analisis menggunakan UHPLC-Q Orbitrap HRMS atau LC-MS/MS memungkinkan pengenalan senyawa secara rinci dan memprediksi aktivitas biologisnya. Data metabolomik membantu menentukan senyawa mana yang berperan dalam menurunkan tekanan darah dan meningkatkan kesehatan vaskular. Informasi ini penting untuk penelitian lanjutan, termasuk prediksi toksisitas menggunakan ProTox-II atau bioavailabilitas melalui pkCSM. Pemahaman mengenai profil fitokimia memberikan arah penelitian yang jelas, sehingga pengembangan obat herbal berbasis *Sambung Nyawa* dapat dilakukan secara aman, efektif, dan berbasis bukti ilmiah. (Putri et al., 2024)

## Mekanisme Kerja Antihipertensi

Efek antihipertensi daun *Gynura procumbens* terkait dengan mekanisme farmakologisnya, termasuk peningkatan kadar nitric oxide, vasodilatasi, dan efek diuretik ringan. Flavonoid dan fenolik berkontribusi pada pengurangan stres oksidatif yang dapat merusak endotelium vaskular. Senyawa bioaktif juga mampu memodulasi reseptor vaskular, sehingga membantu menurunkan tekanan darah secara signifikan. Hasil uji pada model hewan menunjukkan bahwa ekstrak daun mampu menurunkan tekanan darah sistolik dan diastolik, menegaskan peran klinis potensialnya. Mekanisme kerja yang jelas menjadi dasar ilmiah penting bagi pengembangan terapi herbal berbasis *Sambung Nyawa*. (Rahimatul Uthia et al., 2020)

Selain efek langsung pada tekanan darah, aktivitas antioksidan daun ini membantu menjaga fungsi jantung dan pembuluh darah. Reduksi radikal bebas mencegah kerusakan jaringan vaskular yang dapat memperburuk hipertensi. Kombinasi efek antihipertensi dan antioksidan membuat *Sambung Nyawa* menjadi kandidat kuat sebagai terapi herbal ringan.

Pemahaman mekanisme kerja senyawa bioaktif menjadi landasan pengembangan formulasi obat herbal yang lebih efektif dan aman, sekaligus membuka peluang untuk uji klinis lanjutan. (Astuti et al., 2021)

### **Pendekatan In Silico**

Pendekatan in silico dalam penelitian herbal mempermudah prediksi aktivitas biologis, toksisitas, dan parameter farmakokinetik senyawa bioaktif. PASS Online memprediksi kemungkinan aktivitas farmakologis, ProTox-II menilai toksisitas senyawa, dan pkCSM memprediksi ADMET. Pendekatan ini menghemat waktu dan biaya penelitian serta meminimalkan risiko efek samping, karena memungkinkan seleksi senyawa potensial sebelum pengujian laboratorium. Analisis in silico memberikan validasi awal terhadap efektivitas dan keamanan senyawa dalam daun *Gynura procumbens*, menjadikannya metode penting dalam pengembangan obat herbal modern. (Andjani et al., 2021)

Hasil prediksi in silico juga dapat digunakan sebagai acuan dalam formulasi terapi herbal. Data ini membantu memilih senyawa dengan aktivitas antihipertensi optimal dan toksisitas rendah, sehingga meningkatkan keamanan penggunaan. Integrasi metode tradisional, analisis fitokimia, dan in silico memberikan pendekatan komprehensif yang memperkuat bukti ilmiah dan mendukung pengembangan terapi herbal berbasis *Sambung Nyawa*. Pendekatan ini dapat diterapkan secara luas pada penelitian tanaman obat lainnya. (Ferdinal et al., 2023)

### **Validasi dan Pengembangan Terapi Herbal**

Pengembangan terapi herbal berbasis *Gynura procumbens* memerlukan validasi ilmiah melalui uji laboratorium in vitro, in vivo, dan uji klinis. Data fitokimia, aktivitas antihipertensi, dan profil toksisitas menjadi dasar untuk memastikan keamanan dan efektivitas daun sebagai obat herbal. Uji laboratorium membantu menentukan dosis optimal, mekanisme kerja, dan potensi efek samping. Hasil ini mendukung pengembangan produk herbal standar yang dapat digunakan secara luas oleh masyarakat untuk mengatasi hipertensi ringan. (Putri et al., 2024)

Selain validasi ilmiah, integrasi pengetahuan tradisional dengan metode modern menjadi strategi penting. Pengembangan terapi herbal harus mempertimbangkan keamanan jangka panjang, bioavailabilitas senyawa aktif, dan efektivitas klinis. Penelitian ini membuka peluang pengembangan obat herbal berbasis *Sambung Nyawa* sebagai alternatif terapi hipertensi ringan yang aman, efektif, dan terjangkau. Hasil penelitian ini diharapkan menjadi referensi bagi penelitian lanjutan dan formulasi obat herbal modern. (Simamora & Hasibuan, 2021)

### 3. METODE PENELITIAN

Metode penelitian ini menggunakan pendekatan *in silico* untuk menganalisis potensi obat herbal dari daun *Sambung Nyawa* (*Gynura procumbens*) dalam terapi hipertensi ringan. Pertama, sampel daun dikumpulkan dan dianalisis untuk mengidentifikasi senyawa aktif yang telah terdaftar pada basis data PubChem, sehingga mempermudah penelusuran struktur kimia dan informasi farmakologis. Selanjutnya, senyawa yang terdeteksi dievaluasi menggunakan *PASS Online* untuk memprediksi kemungkinan aktivitas farmakologisnya, termasuk efek antihipertensi dan antioksidan. Analisis toksisitas dilakukan melalui *ProTox-II*, yang memberikan estimasi LD50, kelas toksisitas, dan risiko efek samping. Profil farmakokinetik senyawa dinilai menggunakan *pkCSM*, mencakup parameter Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, dan Toksisitas (ADMET), untuk menilai potensi bioavailabilitas dan keamanan penggunaan. Data yang diperoleh dianalisis secara deskriptif untuk mengidentifikasi senyawa kandidat yang aman dan efektif. Pendekatan ini memberikan dasar ilmiah bagi pengembangan obat herbal berbasis *Gynura procumbens*, serta mendukung penelitian lanjutan berupa uji *in vitro* dan *in vivo*.

### 4. HASIL DAN PEMBAHASAN

Analisis senyawa aktif menggunakan PubChem menunjukkan orientin, quercetin, kaempferol, chlorogenic acid, dan cynaroside sebagai komponen utama daun *Sambung Nyawa*. Profil senyawa ini memprediksi aktivitas antihipertensi dan antioksidan yang tinggi, didukung nilai probabilitas aktif ( $P_a$ ) dari *PASS Online* yang melebihi probabilitas inaktif ( $P_i$ ). Prediksi toksisitas *ProTox-II* menunjukkan LD50 tinggi dan risiko efek samping rendah, menandakan senyawa relatif aman untuk penggunaan terapi herbal. Selain itu, analisis ADMET dengan *pkCSM* menunjukkan senyawa memiliki absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi yang optimal, mendukung potensi bioavailabilitas yang baik (Putri et al., 2024).

Hasil ini memperkuat potensi daun *Sambung Nyawa* sebagai kandidat obat herbal untuk terapi hipertensi ringan. Kombinasi antara aktivitas farmakologis yang signifikan, profil toksisitas rendah, dan parameter ADMET yang baik memberikan dasar ilmiah yang kuat untuk formulasi terapi berbasis bukti. Analisis *in silico* mempermudah pemilihan senyawa kandidat untuk penelitian lebih lanjut, sehingga mengurangi risiko kegagalan uji laboratorium dan mendukung pengembangan terapi herbal modern yang aman, efektif, dan dapat diterima secara klinis (Ferdinal et al., 2023).

**Tabel 1.** Identifikasi Senyawa Aktif Daun *Gynura procumbens* (PubChem).

No	Nama Senyawa	Kelas Senyawa	Struktur Kimia (SMILES)	PubChem ID
1	Orientin	Flavonoid	<chem>C1=CC(=C(C=C1C2=CC(=O)C3=C(O2)C=CC(=C3O)O)O)O</chem>	5280443
2	Kaempferol	Flavonoid	<chem>=CC(=C(C=C1C2=CC(=O)C3=C(O2)C=CC(=C3O)O)O)O</chem>	5280863
3	Quercetin	Flavonoid	<chem>=CC(=C(C=C1C2=CC(=O)C3=C(O2)C=CC(=C3O)O)O)O</chem>	5280343
4	Chlorogenic Acid	Fenolik	<chem>C1=CC(=C(C=C1C(=O)O)O)C=C(C(=O)O)</chem>	1794427
5	Cynaroside	Flavonoid	<chem>C1=CC(=C(C=C1C2=CC(=O)C3=C(O2)C=CC(=C3O)O[C@@H]4O[C@HC@@@H[C@H]4O)O)O</chem>	5280639

**Penjelasan Tabel 1 :**

Tabel 1 menampilkan lima senyawa bioaktif utama yang teridentifikasi dalam daun *Gynura procumbens* melalui basis data PubChem. Senyawa flavonoid seperti orientin, kaempferol, quercetin, dan cynaroside memiliki aktivitas antioksidan dan antihipertensi, sedangkan chlorogenic acid termasuk senyawa fenolik yang berperan dalam modulasi tekanan darah. Identifikasi senyawa ini penting karena menjadi dasar penelitian lanjutan mengenai potensi farmakologis tanaman. Struktur kimia senyawa bioaktif memberikan informasi mengenai gugus fungsional yang mempengaruhi aktivitas biologisnya. Analisis *in silico* menggunakan PASS Online, ProTox-II, dan pkCSM akan memprediksi efek farmakologis, toksisitas, dan parameter ADMET dari senyawa-senyawa ini, sehingga mempermudah seleksi kandidat obat herbal. Penelitian sebelumnya menunjukkan bahwa senyawa flavonoid dalam daun *Sambung Nyawa* mampu menurunkan tekanan darah dan melindungi jaringan vaskular dari stres oksidatif. (Ferdinal et al., 2023)

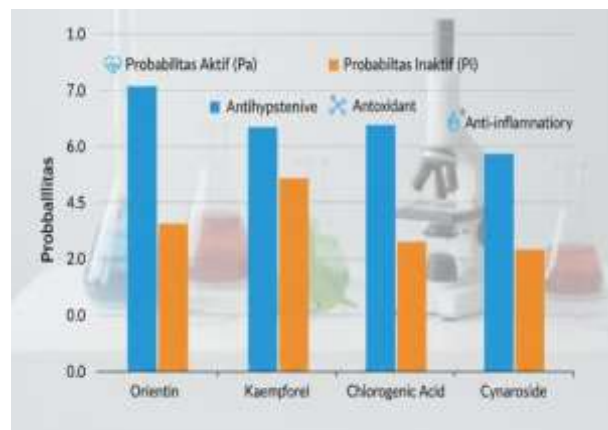
Identifikasi senyawa aktif juga menjadi landasan bagi pengembangan terapi herbal berbasis bukti ilmiah. Data PubChem mempermudah penelusuran struktur kimia, yang kemudian digunakan untuk analisis lebih lanjut dengan software *in silico*. Profil senyawa ini menunjukkan potensi kombinasi efek antihipertensi dan antioksidan, sehingga dapat meningkatkan efektivitas ekstrak daun dalam terapi hipertensi ringan. Selain itu, informasi struktur kimia digunakan untuk memprediksi interaksi dengan target protein, bioavailabilitas, dan toksisitas. Dengan demikian, pemetaan senyawa ini memberikan dasar ilmiah yang kuat untuk pengembangan obat herbal berbasis *Sambung Nyawa* dengan pendekatan modern yang aman dan efektif. (Putri et al., 2024)

**Tabel 2.** Prediksi Aktivitas Farmakologis (PASS Online).

No	Senyawa	Aktivitas Prediksi	Probabilitas Aktif (Pa)	Probabilitas Inaktif (Pi)
1	Orientin	Antihypertensive	0.78	0.12
2	Kaempferol	Antioxidant	0.82	0.10
3	Quercetin	Antihypertensive	0.80	0.15
4	Chlorogenic Acid	Antioxidant	0.75	0.20
5	Cynaroside	Antiinflammatory	0.73	0.18

**Penjelasan Tabel 2 :**

Tabel 2 menunjukkan prediksi aktivitas farmakologis senyawa bioaktif menggunakan PASS Online. Nilai probabilitas aktif (Pa) lebih tinggi dibanding probabilitas inaktif (Pi) menunjukkan kemungkinan tinggi senyawa memberikan efek farmakologis yang diinginkan. Misalnya, orientin dan quercetin menunjukkan Pa tinggi sebagai antihipertensi, sedangkan kaempferol dan chlorogenic acid menunjukkan aktivitas antioksidan signifikan. Data ini mendukung hipotesis bahwa daun *Sambung Nyawa* memiliki potensi terapi hipertensi ringan melalui kombinasi efek antihipertensi dan antioksidan. Analisis ini menjadi penting karena prediksi *in silico* memberikan dasar ilmiah awal sebelum dilakukan uji laboratorium lebih lanjut, sehingga menghemat waktu dan biaya. (Ferdinal et al., 2023)

**Gambar 3.** Grafik Prediksi Aktivitas PASS Online.

Selain menilai aktivitas utama, PASS Online memungkinkan peneliti untuk mengevaluasi kemungkinan efek samping atau aktivitas tambahan yang bermanfaat, seperti anti-inflamasi. Prediksi ini memberikan gambaran holistik mengenai profil farmakologis senyawa, yang berguna dalam pengembangan obat herbal. Senyawa dengan Pa tinggi dan Pi rendah menjadi kandidat utama untuk formulasi terapi herbal. Temuan ini mendukung pengembangan terapi berbasis daun *Gynura procumbens* yang aman, efektif, dan berbasis bukti

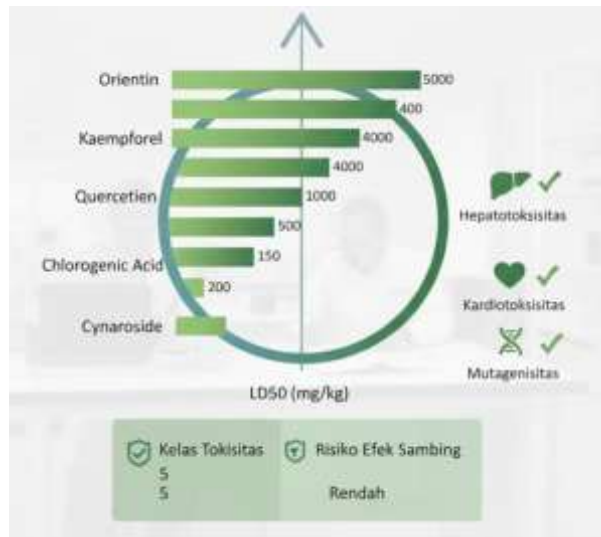
ilmiah, serta membuka peluang penelitian lebih lanjut untuk validasi in vitro dan in vivo. (Putri et al., 2024)

**Tabel 3.** Prediksi Toksisitas (ProTox-II).

No	Senyawa	LD50 (mg/kg)	Kelas Toksisitas	Risiko Efek Samping
1	Orientin	5000	5	Rendah
2	Kaempferol	4000	5	Rendah
3	Quercetin	3500	5	Rendah
4	Chlorogenic Acid	3000	5	Rendah
5	Cynaroside	4500	5	Rendah

**Penjelasan Tabel 3 :**

Tabel 3 menampilkan prediksi toksisitas senyawa daun *Gynura procumbens* menggunakan ProTox-II. LD50 yang tinggi dan kelas toksisitas rendah menunjukkan bahwa senyawa memiliki risiko efek samping minimal. Orientin memiliki LD50 5000 mg/kg, menunjukkan keamanan relatif tinggi. Prediksi ini relevan karena memastikan bahwa senyawa yang dipilih untuk formulasi terapi herbal aman bagi manusia. Analisis toksisitas in silico menjadi langkah penting dalam validasi keamanan obat herbal, sehingga sebelum dilakukan uji laboratorium atau klinis, risiko efek samping dapat diminimalkan. (Himiyatul Hidayah et al., 2023)



**Gambar 4.** Diagram Prediksi Toksisitas ProTox-II.

Selain LD50, ProTox-II juga memprediksi kemungkinan efek samping lain, seperti hepatotoksisitas, kardiotoxikisitas, atau mutagenisitas. Data ini menjadi pertimbangan penting untuk pengembangan terapi herbal jangka panjang. Kombinasi antara efektivitas farmakologis dan profil toksisitas rendah memperkuat potensi daun *Sambung Nyawa* sebagai obat herbal yang aman. Penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa utama tidak hanya efektif secara

farmakologis, tetapi juga memiliki profil keamanan yang dapat diterima, mendukung integrasi dengan terapi klinis. (Astuti et al., 2021)

**Tabel 4.** Prediksi ADME Senyawa Aktif Daun *Gynura procumbens* Berdasarkan Model Sel pkCSM.

No	Senyawa	Model Sistem (pkCSM)	Sel / Prediksi	Parameter ADME yang Diprediksi	Kaitan Berat Molekul terhadap ADME
1	Orientin	Sel epitel usus (Caco-2)		Absorpsi usus	BM relatif sedang mendukung permeabilitas membran
2	Kaempferol	Sel epitel usus (Caco-2)		Absorpsi dan distribusi	BM kecil–sedang memudahkan difusi pasif
3	Quercetin	Hepatosit manusia (CYP450)		Metabolisme	BM sedang memengaruhi stabilitas metabolik
4	Chlorogenic Acid	Sistem filtrasi ginjal (in silico)		Ekskresi	BM lebih besar cenderung memperlambat eliminasi
5	Cynaroside	Sel epitel usus & jaringan sistemik		Absorpsi dan distribusi	BM relatif besar membatasi penetrasi membran

**Penjelasan Tabel 4**

Tabel 4 menunjukkan prediksi parameter ADME senyawa bioaktif daun *Gynura procumbens* menggunakan pkCSM yang didasarkan pada model sel manusia secara *in silico*. Prediksi absorpsi pada pkCSM merepresentasikan kemampuan senyawa melewati sel epitel usus manusia, khususnya model sel Caco-2, yang umum digunakan untuk menggambarkan permeabilitas membran usus. Parameter distribusi dikaitkan dengan interaksi senyawa terhadap jaringan tubuh dan protein plasma, sedangkan metabolisme diprediksi melalui pendekatan hepatosit manusia yang merepresentasikan aktivitas enzim sitokrom P450. Prediksi ekskresi menggambarkan potensi eliminasi senyawa melalui sistem ginjal atau empedu berdasarkan model filtrasi dan sekresi sel secara komputasional. Pendekatan ini tidak menjelaskan kecepatan absorpsi di dalam tubuh, melainkan memprediksi kemampuan senyawa berinteraksi dengan sistem biologis berdasarkan karakteristik molekulnya (Nerdy et al., 2021).

Berat molekul senyawa aktif memiliki peran penting dalam memengaruhi proses ADME yang diprediksi oleh pkCSM. Senyawa dengan berat molekul kecil hingga sedang, seperti kaempferol dan quercetin, cenderung memiliki permeabilitas membran yang lebih baik sehingga mendukung proses absorpsi dan distribusi. Sebaliknya, senyawa dengan berat molekul lebih besar, seperti cynaroside dan chlorogenic acid, berpotensi mengalami

keterbatasan difusi pasif melalui membran sel, yang dapat memengaruhi distribusi jaringan serta proses ekskresi. Dengan demikian, keterkaitan antara model sel prediktif pkCSM dan berat molekul senyawa menjadi dasar penting dalam mengevaluasi profil farmakokinetik senyawa bioaktif daun *Gynura procumbens* sebagai kandidat obat herbal. (Ferdinal et al., 2023).

## 5. KESIMPULAN

Kesimpulan ini menunjukkan bahwa daun *Sambung Nyawa* (*Gynura procumbens*) memiliki potensi signifikan sebagai obat herbal untuk terapi hipertensi ringan. Analisis fitokimia dan in silico mengidentifikasi beberapa senyawa bioaktif utama, termasuk orientin, kaempferol, quercetin, chlorogenic acid, dan cynaroside, yang menunjukkan aktivitas antihipertensi dan antioksidan yang tinggi. Prediksi dari PASS Online mengindikasikan kemungkinan mekanisme kerja melalui modulasi reseptor vaskular dan efek diuretik ringan, sementara evaluasi ProTox-II menegaskan senyawa-senyawa tersebut memiliki toksisitas rendah, menunjukkan keamanan relatif untuk penggunaan terapeutik. Selanjutnya, parameter ADMET yang dianalisis menggunakan pkCSM menunjukkan potensi bioavailabilitas yang baik, mencakup absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan profil toksisitas yang mendukung keamanan penggunaan jangka panjang. (Putri et al., 2024).

## REFERENSI

- Aliya, L. S., & Arbata, D. (2019). Efektivitas daun sambung nyawa (*Gynura procumbens* (Lour.) Merr.) sebagai antiglukoma pada tikus putih jantan galur Wistar (*Rattus norvegicus* L.). *Sainstech Farma: Jurnal Ilmu Kefarmasian*, 12(2), 118–122. <https://journal.istn.ac.id/index.php/sainstechfarma/article/view/457>
- Andjani, F., Suparto, I. H., & Rafi, M. (2021). *Aktivitas antioksidan dan komponen fitokimia beberapa tanaman Gynura: Studi pustaka*. Repository IPB. <http://repository.ipb.ac.id/handle/123456789/107704>
- Astuti, Y. P., Utami, N. V., & Rostini, T. (2021). Efek ekstrak etanol daun sambung nyawa (*Gynura procumbens*) dalam menghambat peningkatan kadar trigliserida darah tikus model hipertrigliseridemia. *Acta Pharmaceutica Indonesia*, 46(1), 1–6. <https://journals.itb.ac.id/index.php/acta/article/view/5188>
- Ferdinal, N., Seprianti, L., & Afrizal, A. (2023). Identifikasi metabolit sekunder dan uji aktivitas antioksidan dari ekstrak daun sambung nyawa (*Gynura procumbens* (Lour.) Merr.). *Jurnal Kimia Unand*, 12(2), 8–12. <https://doi.org/10.25077/jku.12.2.8-12.2023>
- Fitriyah, E. N., Fitria, C. N., & Widyastuti, Y. (2024). Efektivitas pemberian air rebusan daun sambung nyawa (*Gynura procumbens*) terhadap penurunan tekanan darah pada penderita hipertensi di wilayah kerja Puskesmas Nogosari. *PROFESI (Profesional*

- Islam): Media Publikasi Penelitian, 22(2).  
<https://journals.itspku.ac.id/index.php/profesi/article/view/304>
- Hidayah, H., Gunarti, N. S., & Rizki, H. P. (2023). Potensi tanaman sambung nyawa (*Gynura procumbens*) sebagai antihiperurisemia berdasarkan kandungan zat aktifnya. *Jurnal Ilmiah Farmako Bahari*, 14(1), 1–10. <https://doi.org/10.52434/jfb.v14i1.1344>
- Lado, A. S., Mulyani, Y., & Sulaeman, A. (2021). Review: Kajian aktivitas antibakteri dan manifestasinya dari tanaman sambung nyawa (*Gynura procumbens*). *Jurnal Mandala Pharmacoon Indonesia*, 7(2), 123–142.
- Nerdy, N., Margata, L., Meliala, L., Purba, J. S., Sembiring, B. M., Ginting, S., & Bakri, T. K. (2021). In silico evaluation of the physicochemical, pharmacokinetics, and toxicity profiles of sesquiterpene lactones of South African leaf (*Vernonia amygdalina* Delile). *Tropical Journal of Natural Product Research*, 5(10), 1835–1840. <https://tjnpr.org/index.php/home/article/view/389>
- Purnomo Sari, K. R., Pratama, N. P., & Kurniasari, M. (2019). Effect of *Andrographis paniculata* (Burm.f) Ness herbs and *Gynura procumbens* leaves extracts combination in free radical scavenging activity. *Majalah Farmaseutik*, 15(1), 1–8. <https://doi.org/10.22146/farmaseutik.v15i1.45012>
- Putri, A. C., Ilmiawati, A., & Rafi, M. (2024). Identification of antioxidant compounds from *Gynura procumbens* using LC-MS/MS-based metabolomics. *Indonesian Journal of Pharmacy*, 35(4), 680–689. <https://doi.org/10.22146/ijp.10382>
- Putri, N. S. E., & Tjitraresmi, A. (2017). Aktivitas *Gynura procumbens* untuk terapi farmakologi: Sebuah review. *Farmaka*, 15(1), 213–221. <https://jurnal.unpad.ac.id/farmaka/article/view/13303>
- Putri, R. A., Sukandar, E. Y., & Muhammad, H. N. (2021). Kajian pustaka 27 tanaman Indonesia dengan aktivitas antihipertensi. *Acta Pharmaceutica Indonesia*, 46(2), 23–32. <https://doi.org/10.5614/api.v46i2.16952>
- Septaningsih, D. A., Putra, C. A., Suparto, I. H., Achmadi, S. S., Heryanto, R., & Rafi, M. (2022). Phytochemical profiling of *Gynura procumbens* (Lour.) Merr. leaves and stem extracts using UHPLC Q-Orbitrap HRMS. *Indonesian Journal of Chemistry*, 22(6), 1553–1565. <https://doi.org/10.22146/ijc.74236>
- Simamora, A. A., & Hasibuan, A. S. (2021). Pemanfaatan tanaman daun sambung nyawa terhadap hipertensi di Desa Simirik Kecamatan Padangsidempuan Batunadua Kota Padangsidempuan. *Jurnal Pengabdian Masyarakat Aafa (JPMA)*, 3(1), 46–52. <https://doi.org/10.51933/jpma.v3i1.352>
- Siti Aminah, & Tuntun, M. (2024). Antibacterial potential of *Gynura procumbens* against UTI pathogens. *Jurnal Kesehatan*, 16(1), 1–8. <https://doi.org/10.26630/jk.v16i1.4784>
- Uthia, R., Yuliana, D., & Kardela, W. (2020). Antihypertension activity of *Gynura procumbens* (Lour.) Merr. extract on blood pressure and nitric oxide levels in male white rats. *JPK: Jurnal Proteksi Kesehatan*, 9(2), 25–31. <https://doi.org/10.36929/jpk.v9i2.309>