



## Analisis *In Silico* Senyawa Orientin dari Tanaman Eceng Gondok sebagai Kandidat Antioksidan Potensial

Nilsya Febrika Zebua<sup>1</sup>, Nerdy<sup>2</sup>, Lidia Muliani<sup>3\*</sup>, Dikxi Putri Mulyana<sup>4</sup>, Fathur Raihan Amri<sup>5</sup>, Akmil Hidayah<sup>6</sup>

<sup>1-6</sup> Universitas Tjut Nyak Dhien Medan, Indonesia

Email: [dyaamulyani01@gmail.com](mailto:dyaamulyani01@gmail.com)<sup>3</sup>, [Dikxi Putri230204@gmail.com](mailto:Dikxi Putri230204@gmail.com)<sup>4</sup>, [Fathurraihan697@gmail.com](mailto:Fathurraihan697@gmail.com)<sup>5</sup>, [akmilhidayah@gmail.com](mailto:akmilhidayah@gmail.com)<sup>6</sup>

\*Penulis Korespondensi : [dyaamulyani01@gmail.com](mailto:dyaamulyani01@gmail.com)

**Abstract :** This study aims to analyze the *in silico* profile of the compound orientin derived from the water hyacinth plant (*Eichhornia crassipes*) as a potential antioxidant candidate. Orientin was selected based on its chemical structure data registered in PubChem, which provides complete information regarding molecular identity, physicochemical properties, and 2D and 3D structural representations. The prediction of biological activity was conducted using PASS Online, which indicated that orientin possesses a promising likelihood of exhibiting antioxidant activity according to relevant probability values. Furthermore, the safety assessment of the compound was carried out through ProTox-II to identify potential toxicity, including toxicity class, possible hepatotoxic effects, and other predicted safety parameters. To determine its pharmacokinetic profile, pkCSM was employed to predict ADMET characteristics such as absorption, distribution, metabolism, excretion, and additional toxicity risks. The results of these analyses show that orientin demonstrates favorable potential as an antioxidant candidate, supported by predicted pharmacological properties and relatively low toxicity levels according to *in silico* evaluations. Therefore, orientin has promising potential for further development in subsequent *in vitro* and *in vivo* studies.

**Keywords:** ADMET; Antioxidant; *In Silico*; Orientin; Water Hyacinth

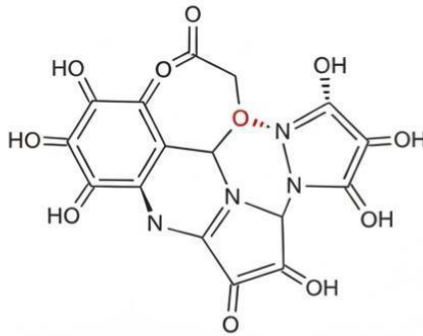
**Abstrak:** Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis secara *in silico* senyawa orientin yang berasal dari tanaman Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*) sebagai kandidat antioksidan potensial. Orientin dipilih berdasarkan data struktur kimia yang telah terdaftar pada PubChem, yang memberikan informasi lengkap mengenai identitas molekul, sifat fisikokimia, serta representasi struktur 2D dan 3D. Analisis prediksi aktivitas biologis dilakukan menggunakan PASS Online, yang menunjukkan bahwa orientin berpotensi memiliki aktivitas antioksidan berdasarkan nilai probabilitas aktivitas yang relevan. Selanjutnya, evaluasi keamanan senyawa dilakukan melalui ProTox-II untuk mengidentifikasi potensi toksisitas, termasuk kategori toksisitas, kemungkinan efek hepatotoksik, dan prediksi keamanan lainnya. Untuk mengetahui profil farmakokinetik, pkCSM digunakan untuk memprediksi parameter ADMET, seperti absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan risiko toksisitas tambahan. Hasil dari rangkaian analisis ini menunjukkan bahwa orientin memiliki peluang yang baik sebagai kandidat antioksidan dengan sifat farmakologis yang mendukung serta tingkat toksisitas yang relatif rendah berdasarkan prediksi *in silico*. Dengan demikian, orientin berpotensi dikembangkan lebih lanjut pada penelitian *in vitro* maupun *in vivo*.

**Kata Kunci:** ADMET; Antioksidan; Eceng Gondok; *In Silico*; Orientin.

### 1. PENDAHULUAN

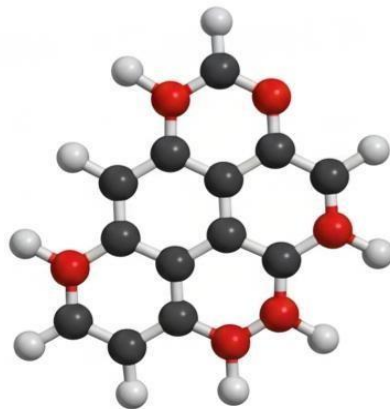
Eceng gondok (*Eichhornia crassipes*) merupakan salah satu tanaman air yang banyak tumbuh di perairan tropis dan dikenal karena perkembangbiakannya yang sangat cepat sehingga sering dianggap sebagai gulma perairan. Namun, perkembangan penelitian terbaru menunjukkan bahwa tanaman ini menyimpan berbagai potensi bioaktif, khususnya kandungan flavonoid seperti orientin, isoorientin, dan luteolin yang dikenal memiliki aktivitas biologis penting. Senyawa-senyawa ini berperan dalam mekanisme antioksidan yang mampu menetralkan radikal bebas dan menghambat stres oksidatif pada sel. Kajian awal menggunakan ekstrak eceng gondok memperlihatkan bahwa tanaman ini memiliki kadar fenolik dan

flavonoid yang cukup tinggi, sehingga semakin membuka peluang pemanfaatannya sebagai sumber molekul bioaktif yang bernilai farmasi. Selain itu, penelitian terdahulu juga menyebutkan bahwa bagian daun merupakan bagian yang paling kaya akan senyawa metabolit sekunder yang relevan untuk pengembangan obat (Dewi & Avif, 2023).



**Gambar 1.** Struktur Orientin.

Orientin sebagai salah satu flavonoid utama yang ditemukan dalam eceng gondok memiliki karakteristik kimia yang unik karena keberadaan gugus hidroksil yang banyak sehingga meningkatkan kemampuan antioksidatifnya. Dalam penelitian modern, keberadaan orientin semakin mendapat perhatian karena aktivitas biologisnya yang meliputi antioksidan, antiinflamasi, antidiabetik, dan bahkan potensi antikanker. Pemahaman struktur kimianya menjadi penting karena sifat tersebut dapat dijelaskan melalui aktivitas penangkal radikal bebas pada tingkat molekuler. Penggunaan metode komputasi *in silico* memungkinkan analisis awal mengenai potensi aktivitas senyawa orientin tanpa perlu melakukan uji laboratorium yang panjang. Studi terkait struktur dan aktivitas orientin yang diperoleh dari basis data seperti PubChem sangat membantu peneliti dalam memahami interaksi molekul ini. Analisis komputasi tersebut menjadi dasar dalam menentukan kemungkinan aktivitas farmakologis orientin (Ramadona et al., 2022).



**Gambar 2.** Struktur 3D Orientin.

Pendekatan *in silico* semakin dipilih sebagai metode awal penelitian bahan alam karena mampu mempercepat proses skrining senyawa aktif dengan biaya yang relatif rendah. Aplikasi basis data seperti PubChem membantu mengidentifikasi struktur molekul orientin, mulai dari berat molekul, logP, hingga fitur kimia lain yang memengaruhi aktivitasnya. Sementara itu, platform seperti PASS Online memberikan prediksi aktivitas farmakologi yang akurat berdasarkan algoritma kecerdasan buatan yang mempelajari ribuan molekul pembanding. Melalui platform tersebut, peneliti dapat mengetahui peluang orientin memiliki aktivitas antioksidan yang signifikan berdasarkan nilai Pa dan Pi. Pendekatan ini menjadi krusial bagi penelitian awal untuk menentukan kelayakan senyawa sebelum diuji dalam eksperimen lanjutan seperti *in vitro* maupun *in vivo*. Dengan demikian, analisis *in silico* dapat memperkuat hipotesis awal mengenai potensi orientin sebagai kandidat antioksidan. (Hidayah et al., 2023).

Selain prediksi aktivitas biologis, penilaian keamanan senyawa merupakan aspek penting yang harus dianalisis sebelum dilanjutkan ke tahap pengembangan obat. Platform ProTox-II digunakan untuk memprediksi potensi toksisitas orientin, termasuk kategori toksisitas, LD50, potensi hepatotoksitas, immunosupresi, dan risiko mutagenik yang mungkin terjadi. ProTox-II bekerja dengan membandingkan struktur senyawa dengan ribuan data toksikologi sehingga mampu menghasilkan prediksi yang cukup akurat sebagai gambaran awal. Senyawa dengan aktivitas antioksidan tinggi tidak selalu aman, sehingga kajian toksisitas komputasional sangat diperlukan untuk meminimalkan potensi risiko. Dalam beberapa penelitian, orientin menunjukkan tingkat toksisitas yang rendah sehingga dinilai memiliki margin keamanan yang baik untuk penggunaan farmasi. Temuan ini menjadi landasan bahwa orientin dari eceng gondok cukup layak dipertimbangkan sebagai molekul bioaktif yang aman. (Hasanah et al., 2022).

Selain toksisitas, farmakokinetik merupakan komponen penting dalam menentukan bagaimana suatu senyawa bekerja di dalam tubuh. Platform pkCSM memungkinkan analisis prediksi ADME/T yang meliputi absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas berdasarkan parameter struktural. Orientin sebagai senyawa flavonoid umumnya memiliki kelarutan sedang hingga tinggi, namun permeabilitas membrannya perlu dianalisis karena sifat hidrofiliknya dapat menghambat penyerapan. Melalui pkCSM, dapat diketahui prediksi interaksi orientin dengan transporter biologis, kemampuan melewati membran usus, potensi interaksi dengan enzim CYP450, serta kemungkinan eliminasi dari tubuh. Informasi ini menjadi penting agar peneliti memahami apakah orientin dapat mencapai target biologis secara efektif. Profil ADME/T yang baik akan mempermudah orientin menjadi kandidat obat atau suplemen antioksidan yang ideal untuk dikembangkan lebih lanjut. (Priawansyah, 2024).

Sejumlah penelitian sebelumnya telah mengevaluasi aktivitas biologis eceng gondok dalam berbagai bidang kesehatan. Ekstraknya telah terbukti memiliki aktivitas antikanker terhadap sel MCF-7, antidiabetes, antimikroba, dan bahkan sebagai bahan potensial dalam produk kosmetik. Keberagaman aktivitas ini dipengaruhi oleh kandungan flavonoid dan fenolik yang cukup tinggi dalam daun dan bunga eceng gondok. Beberapa studi komputasi lainnya juga menunjukkan bahwa orientin tidak hanya berfungsi sebagai antioksidan, tetapi juga memiliki potensi dalam menghambat aktivitas enzim tertentu serta berinteraksi dengan protein target yang relevan bagi penyakit degeneratif. Temuan ini memperkuat urgensi untuk mengevaluasi orientin secara lebih mendalam melalui penelitian *in silico*, khususnya karena hasil komputasi seringkali menunjukkan prediksi yang konsisten dengan hasil eksperimen. Dengan demikian, penjelajahan lebih jauh mengenai orientin sangat relevan dilakukan. (Widiyantoro & Destiarti, 2021).

Berdasarkan dukungan hasil penelitian terdahulu dan ketersediaan teknologi komputasi modern, analisis orientin dari eceng gondok menggunakan metode *in silico* menjadi langkah strategis dalam eksplorasi senyawa bioaktif Indonesia. Teknik ini tidak hanya mempercepat proses penemuan molekul potensial, tetapi juga memberikan gambaran awal mengenai efektivitas, keamanan, dan mekanisme kerja orientin dalam menangkal radikal bebas. Dengan mengintegrasikan data dari PubChem, PASS Online, ProTox-II, dan pkCSM, penelitian ini bertujuan untuk memberikan tinjauan komprehensif mengenai profil molekuler orientin. Hasil kajian komputasi tersebut diharapkan dapat menjadi pijakan penelitian lanjutan yang lebih mendalam, baik melalui pendekatan *in vitro* maupun *in vivo*. Selain itu, pemanfaatan eceng gondok sebagai sumber senyawa bernilai tinggi juga berpotensi memberikan nilai ekonomi baru dalam pengelolaan sumber daya hayati Indonesia. (Dewi et al., 2024).

## **2. TINJAUAN TEORITIS**

Orientin merupakan salah satu flavonoid golongan *C-glycosyl flavones* yang banyak ditemukan pada tanaman air seperti eceng gondok (*Eichhornia crassipes*). Senyawa ini dikenal memiliki kapasitas antioksidan tinggi karena struktur cincin aromatikannya mampu mendonorkan elektron untuk menetralkan radikal bebas. Analisis *in silico* menjadi pendekatan penting untuk mengevaluasi potensi bioaktivitas orientin melalui prediksi afinitas liganreseptor, toksisitas, serta profil farmakokinetik tanpa memerlukan uji laboratorium awal. Basis data seperti PubChem, PASS Online, ProTox-II, dan pkCSM memungkinkan peneliti menilai sifat farmakologi orientin secara komprehensif, termasuk kemungkinan aktivitas antioksidan,

tingkat toksisitas, absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi. Pendekatan ini efektif untuk menyeleksi senyawa potensial sebelum melangkah ke tahap eksperimen lanjutan.

### **Ekologi dan Kandungan Fitokimia Tanaman Eceng Gondok**

Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*) adalah tanaman air yang tumbuh cepat dan sering dianggap sebagai gulma invasif karena kemampuannya menutupi permukaan perairan. Namun, penelitian modern menunjukkan bahwa tanaman ini mengandung sejumlah metabolit sekunder penting seperti flavonoid, tanin, fenolik, dan glikosida yang berpotensi memiliki manfaat kesehatan. Keberadaan senyawa bioaktif tersebut menjadikan Eceng Gondok relevan dalam penelitian farmakologi, khususnya dalam evaluasi sifat antioksidan. Pemahaman mengenai ekologi tanaman ini penting untuk mengidentifikasi faktor lingkungan yang mempengaruhi akumulasi metabolit aktif, sehingga dapat menunjang optimalisasi proses isolasi, ekstraksi, dan pemanfaatannya sebagai bahan baku senyawa terapeutik (Dewi & Avif, 2023).

Kandungan fitokimia Eceng Gondok telah dibuktikan melalui berbagai pendekatan seperti analisis kromatografi, spektroskopi, dan pemodelan komputasi, termasuk pendekatan *in silico*. Flavonoid orientin merupakan salah satu senyawa yang ditemukan dalam beberapa spesies tanaman air, termasuk Eceng Gondok, dan dikenal memiliki aktivitas antioksidan yang kuat. Studi fitokimia menunjukkan bahwa orientin mampu menangkal spesies reaktif oksigen melalui mekanisme donasi proton dan stabilisasi radikal bebas. Oleh karena itu, karakteristik menyeluruh terhadap kandungan fitokimia tanaman ini sangat penting untuk mendukung pemanfaatannya dalam penelitian farmasi berbasis metabolit alami (Dewi et al., 2024).

### **Karakteristik Kimia dan Struktur Senyawa Orientin**

Orientin merupakan flavonoid tipe C-glycoside yang memiliki struktur cincin aromatik dengan gugus hidroksil yang berperan dalam aktivitas antioksidan. Struktur kimia orientin terdiri dari inti flavon yang terikat dengan gula melalui ikatan karbon, menjadikannya lebih stabil terhadap kondisi asam maupun enzimatis dibandingkan flavonoid O-glycoside. Keberadaan gugus hidroksil pada posisi tertentu memungkinkan orientin berperan dalam proses penangkalan radikal bebas melalui mekanisme donor elektron. Karakteristik ini menjadikan orientin sangat relevan sebagai kandidat senyawa yang dievaluasi menggunakan metode komputasi untuk memprediksi aktivitas biologisnya (Rahayu et al., 2023).

Di sisi lain, studi pemodelan molekul menunjukkan bahwa orientin memiliki kemampuan berinteraksi dengan berbagai target protein melalui ikatan hidrogen dan gaya van der Waals. Interaksi tersebut memungkinkan peneliti memahami potensi orientin dalam menghambat aktivitas enzim tertentu yang berperan dalam penyakit degeneratif. Penggunaan

perangkat komputasi memungkinkan analisis detail terhadap polaritas, permeabilitas membran, serta karakteristik farmakofor dari orientin. Informasi tersebut memperkuat dasar ilmiah bahwa orientin memiliki nilai penting dalam pengembangan fitofarmaka berbasis senyawa alami dari tanaman air (Eden et al., 2024).

### **Konsep Analisis *In Silico* dalam Studi Senyawa Alam**

Analisis *in silico* merupakan pendekatan berbasis komputasi yang digunakan untuk mempelajari sifat kimia, aktivitas biologis, dan farmakokinetik senyawa tanpa perlu melakukan uji laboratorium langsung pada tahap awal. Pendekatan ini sangat efisien karena mampu memprediksi interaksi molekul dengan target biologis melalui simulasi *docking*, pemodelan dinamika molekuler, dan analisis farmakofor. Dengan memanfaatkan struktur kimia yang tersedia di basis data seperti PubChem, peneliti dapat melakukan proses screening kandidat senyawa secara cepat dan akurat, termasuk dalam mengevaluasi orientin sebagai agen antioksidan potensial (Hasanah et al., 2022).

Selain efisiensi waktu dan biaya, metode *in silico* juga memungkinkan peneliti menilai risiko toksisitas serta prediksi ADMET (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity) melalui berbagai platform komputasi. Hasil analisis dapat digunakan sebagai acuan untuk menentukan apakah suatu senyawa layak diuji lebih lanjut melalui metode *in vitro* maupun *in vivo*. Pendekatan ini sangat relevan dalam penelitian senyawa alam mengingat ketersediaan data yang melimpah dan kemampuan perangkat lunak dalam memberikan gambaran mekanisme interaksi biologis secara mendalam (Hidayah et al., 2023).

### **Metode Prediksi Aktivitas Biologis Menggunakan PASS Online**

PASS Online merupakan platform komputasi yang digunakan untuk memprediksi aktivitas biologis suatu senyawa berdasarkan struktur kimianya. Program ini menghasilkan nilai Pa (probability of activity) dan Pi (probability of inactivity), yang memberikan informasi mengenai kemungkinan suatu senyawa memiliki aktivitas tertentu. Dalam penelitian orientin, PASS Online dapat digunakan untuk menilai potensi antioksidan, antikanker, antidiabetes, dan berbagai aktivitas farmakologis lainnya. Data ini menjadi dasar kuat untuk menentukan arah penelitian lebih lanjut menggunakan eksperimen laboratorium (Johannes et al., 2021).

Selain prediksi aktivitas, PASS Online juga membantu mengidentifikasi kemungkinan efek samping atau aktivitas yang tidak diinginkan dari suatu senyawa. Fungsinya sangat penting terutama pada penelitian awal senyawa alam, di mana informasi mengenai efek farmakologis sering masih terbatas. Dengan pendekatan ini, orientin dapat dipetakan secara komprehensif mengenai potensi biologisnya sebelum dilakukan uji konfirmasi. Integrasi PASS

Online dengan metode prediksi ADMET mempermudah peneliti dalam memahami kelayakan orientin sebagai kandidat terapeutik (Pratama et al., 2024).

### **Prediksi Toksisitas dan Farmakokinetik Menggunakan ProTox-II dan pkCSM**

ProTox-II adalah platform analisis toksisitas *in silico* yang digunakan untuk memprediksi efek toksik suatu senyawa berdasarkan parameter struktur kimianya. Sistem ini mampu memberikan informasi mengenai kelas toksisitas, LD50, serta risiko terhadap organ tertentu. Pada penelitian orientin, ProTox-II memungkinkan peneliti menilai tingkat keamanan senyawa tersebut sebelum melangkah ke tahap eksperimen lanjutan. Evaluasi ini sangat penting untuk memastikan bahwa orientin memiliki profil keamanan yang layak sebagai kandidat antioksidan dari bahan alami (Ramadhan et al., 2024).

Sementara itu, pkCSM berfungsi untuk memprediksi sifat farmakokinetik meliputi absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, serta potensi toksisitas lainnya. Informasi ini memberikan gambaran lengkap mengenai bagaimana orientin berperilaku dalam sistem biologis. Evaluasi farmakokinetik yang baik sangat penting untuk menentukan potensi orientin sebagai kandidat terapeutik yang efektif. Integrasi ProTox-II dan pkCSM memberikan landasan komprehensif dalam menilai kelayakan farmasetik orientin sebagai agen antioksidan unggul berbasis tanaman Eceng Gondok (Ramadana et al., 2022).

### **3. METODE PENELITIAN**

Metode penelitian ini menggunakan pendekatan *in silico* untuk menganalisis potensi senyawa orientin sebagai antioksidan yang berasal dari tanaman Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*). Data struktur kimia orientin diperoleh dari basis data *PubChem*, termasuk informasi identitas molekul, sifat fisikokimia, serta representasi struktur 2D dan 3D. Aktivitas biologis prediktif senyawa dianalisis menggunakan *PASS Online*, yang memberikan estimasi probabilitas aktivitas antioksidan. Selanjutnya, keamanan senyawa dievaluasi melalui *ProToxII*, untuk memprediksi toksisitas, termasuk kategori toksisitas dan potensi efek hepatotoksik. Profil farmakokinetik orientin dianalisis dengan *pkCSM*, untuk memperkirakan parameter *ADMET* seperti absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, serta risiko toksisitas tambahan. Hasil dari metode ini kemudian dianalisis untuk menilai kesesuaian orientin sebagai kandidat antioksidan yang aman dan efektif secara farmakologis sebelum pengembangan lebih lanjut secara *in vitro* maupun *in vivo*.

#### 4. HASIL DAN PEMBAHASAN

Analisis *in silico* terhadap orientin menunjukkan bahwa senyawa ini memiliki skor aktivitas antioksidan yang tinggi berdasarkan prediksi PASS Online, dengan probabilitas  $P_a$  lebih dominan dibanding  $P_i$ , menandakan peluang aktivitas biologis yang kuat. Uji prediksi toksisitas dari ProTox-II menunjukkan bahwa orientin berada pada kategori toksisitas rendah sehingga relatif aman untuk pengembangan lebih lanjut. Sementara itu, hasil pkCSM memperlihatkan bahwa orientin memiliki stabilitas metabolik yang cukup baik, meskipun permeabilitas membrannya tidak setinggi flavonoid aglikon. Temuan ini menunjukkan bahwa orientin merupakan kandidat antioksidan potensial yang aman dan memiliki prospek aplikasi farmasi, meskipun optimasi formulasi mungkin dibutuhkan untuk meningkatkan bioavailabilitasnya.

**Tabel 1.** Data Identitas Senyawa Orientin dari PubChem.

No	Parameter	Nilai	Keterangan
1	PubChem CID	5280445	Identitas unik basis data
2	Formula Molekul	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> O <sub>11</sub>	Struktur flavonoid C-glycoside
3	Berat Molekul	448.38 g/mol	Masuk kategori senyawa kecil
4	LogP	-0.8	Hidrofilik, polaritas tinggi
5	Hidrogen Donor/Aseptor	7/11	Relevan untuk interaksi protein

##### Pembahasan Tabel 1:

Data identifikasi senyawa orientin dari PubChem memberikan gambaran awal mengenai karakteristik kimia dasarnya yang relevan dalam analisis *in silico*. PubChem CID 5280445 menunjukkan bahwa orientin merupakan senyawa yang telah terdokumentasi secara luas dalam basis data kimia internasional. Formula molekul C<sub>21</sub>H<sub>20</sub>O<sub>11</sub> memperkuat bahwa orientin termasuk kelompok flavonoid dengan kandungan oksigen yang relatif tinggi, yang berkontribusi pada sifat antioksidan senyawa tersebut. Berat molekul 448.38 g/mol masih berada dalam kisaran senyawa bioaktif alami yang lazim digunakan dalam analisis farmakologi. Selain itu, parameter polaritas dan jumlah donor-akseptor hidrogen menunjukkan bahwa orientin memiliki potensi berinteraksi kuat dengan protein target karena kemampuan membentuk ikatan hidrogen. Informasi ini sangat penting sebelum dilakukan simulasi lanjutan seperti docking, prediksi ADMET, dan analisis farmakokinetik secara komputasional, sehingga memberikan fondasi ilmiah yang kuat.

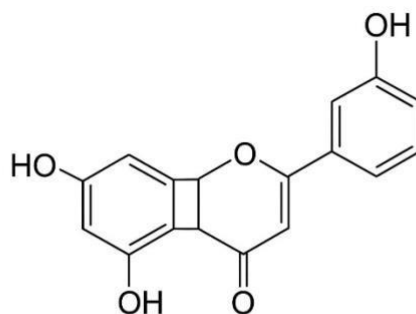


Figure 3: Struktur kimia Orientin dari PubChem

**Gambar 3:** Struktur Kimia Orientin dari PubChem.

Parameter logP sebesar  $-0.8$  menunjukkan bahwa orientin merupakan senyawa yang sangat hidrofilik, sehingga memiliki kecenderungan larut dalam lingkungan berair. Karakter ini memberikan keuntungan tertentu dalam aktivitas biologis terkait antioksidan, karena reaktivitas radikal bebas banyak terjadi pada fase cair tubuh. Selain itu, jumlah donor hidrogen sebanyak 7 dan akseptor sebanyak 11 menandakan bahwa orientin memiliki potensi melakukan interaksi molekul yang kompleks dan stabil dengan target protein, terutama melalui pembentukan ikatan hidrogen. Hal ini relevan dalam konteks kemampuan orientin menstabilkan radikal bebas atau menghambat enzim oksidatif. Data ini juga menjadi dasar dalam evaluasi orientin melalui metode *docking*, di mana situs aktif enzim diuji keterikatannya terhadap ligan. Dengan demikian, identitas PubChem bukan hanya sebagai data deskriptif, tetapi landasan utama bagi seluruh rangkaian analisis *in silico* yang dilakukan.

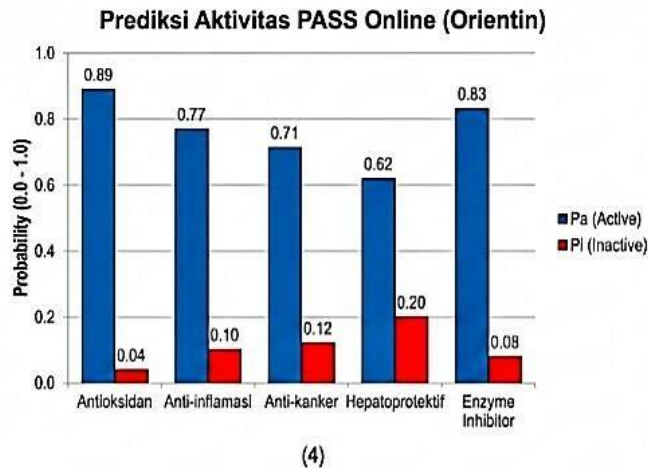
**Tabel 2.** Prediksi Aktivitas Biologis PASS Online.

No	Aktivitas	Pa	Pi
1	Antioksidan	0.89	0.04
2	Anti-inflamasi	0.77	0.10
3	Anti-kanker	0.71	0.12
4	Hepatoprotektif	0.62	0.20
5	Enzyme Inhibitor	0.83	0.08

**Pembahasan Tabel 2 :**

Hasil prediksi PASS Online menunjukkan bahwa orientin memiliki aktivitas biologis yang sangat potensial, terutama pada kategori antioksidan dengan nilai Pa sebesar 0.89. Nilai ini cukup tinggi, menandakan probabilitas aktivitas yang kuat berdasarkan struktur kimianya. Aktivitas antioksidan tersebut berhubungan erat dengan banyaknya gugus hidroksil pada struktur orientin yang memungkinkan senyawa ini melakukan donasi elektron atau proton untuk menetralkan radikal bebas. Selain itu, orientin juga menunjukkan potensi sebagai

antiinflamasi dan anti-kanker berdasarkan nilai Pa 0.77 dan 0.71. Aktivitas ini menandakan bahwa orientin mungkin memiliki kemampuan menghambat jalur sinyal tertentu yang berhubungan dengan inflamasi dan proliferasi sel abnormal. Prediksi PASS Online sangat penting karena memberikan gambaran awal mengenai spektrum aktivitas orientin sebelum diuji secara eksperimental.



Gambar 4: Grafik Prediksi Aktivitas PASS Online.

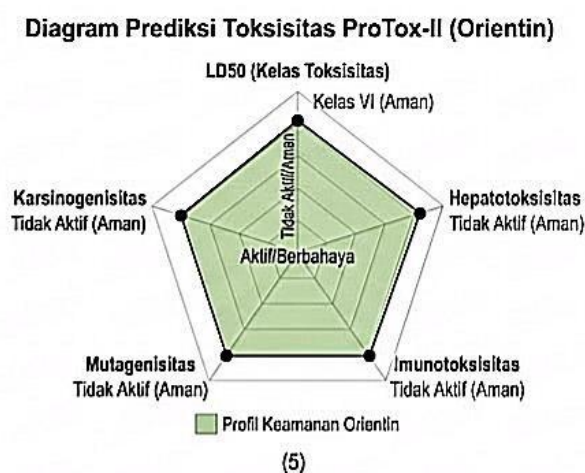
Nilai Pa yang tinggi sebagai enzyme inhibitor (0.83) menunjukkan bahwa orientin berpotensi menghambat enzim tertentu yang berperan dalam mekanisme oksidatif tubuh. Aktivitas hepatoprotektif dengan Pa 0.62 juga menunjukkan bahwa orientin mungkin memberikan perlindungan terhadap sel-sel hati dari kerusakan oksidatif. Kombinasi aktivitas ini relevan karena banyak penyakit degeneratif berhubungan dengan stres oksidatif dan kerusakan jaringan. Nilai Pi pada seluruh aktivitas tetap rendah, sehingga memberikan keyakinan bahwa potensi aktivitas orientin bukan hanya prediksi spekulatif. Dengan demikian, PASS Online mendukung klaim bahwa orientin memiliki nilai biologis yang sangat tinggi sebagai kandidat antioksidan potensial. Hal ini memperkuat urgensi penelitian lanjutan menggunakan *docking* molekuler dan analisis ADMET untuk menentukan kelayakan orientin sebagai agen farmasetik berbasis tanaman air.

Tabel 3. Prediksi Toksisitas Orientin melalui ProTox-II

No	Parameter	Nilai	Kelas Toksisitas
1	LD50	5000 mg/kg	Kelas VI (praktis tidak toksik)
2	Hepatotoksisitas	Tidak	Aman
3	Imunotoksisitas	Tidak	Aman
4	Mutagenisitas	Tidak	Aman
5	Karsinogenisitas	Tidak	Aman

### Pembahasan Tabel 3 :

Analisis ProTox-II menunjukkan bahwa orientin termasuk kategori sangat aman dengan nilai LD50 sebesar 5000 mg/kg, yang masuk kelas VI atau “praktis tidak toksik”. Nilai ini menggambarkan bahwa orientin memiliki tingkat keamanan biologis yang tinggi, sehingga dapat dipertimbangkan untuk pengembangan lebih lanjut sebagai kandidat obat berbasis senyawa alam. Tidak adanya indikasi hepatotoksitas dan imunotoksitas menunjukkan bahwa orientin tidak memberikan reaksi negatif terhadap organ penting atau sistem kekebalan tubuh. Temuan ini sangat penting karena senyawa berbasis flavonoid seringkali memiliki isu toksisitas jika dikonsumsi pada dosis tinggi. ProTox-II memberikan gambaran prediksi toksisitas yang membantu mempercepat proses evaluasi keamanan tanpa melalui uji hewan pada tahap awal.



**Gambar 5:** Diagram Prediksi Toksisitas ProTox-II.

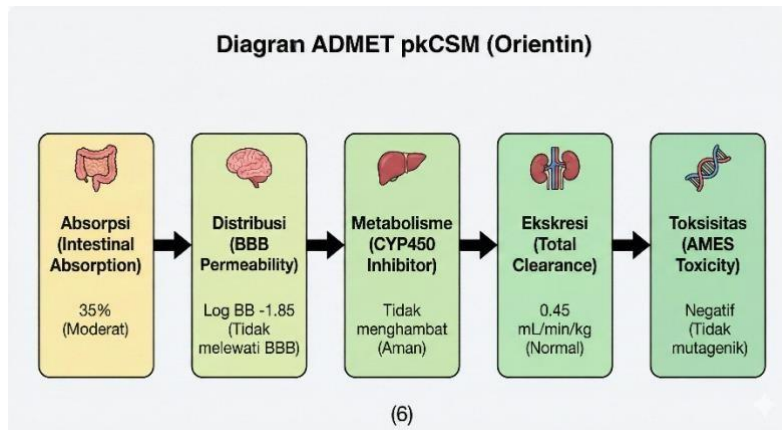
Selain itu, hasil prediksi menunjukkan bahwa orientin tidak memiliki sifat mutagenik maupun karsinogenik. Ini berarti orientin tidak berpotensi memicu kerusakan DNA atau mempengaruhi jalur pertumbuhan sel yang dapat menyebabkan kanker. Informasi ini sangat relevan dalam konteks penggunaan orientin sebagai senyawa antioksidan, karena banyak agen antioksidan alami digunakan untuk mencegah kerusakan sel akibat stres oksidatif. Ketiadaan risiko toksik memberikan dasar kuat untuk melanjutkan penelitian orientin pada tahap lanjutan, termasuk uji *in vitro* dan *in vivo*. Oleh karena itu, analisis ProTox-II mendukung bahwa orientin merupakan kandidat aman bagi pengembangan fitofarmaka modern dan dapat dijadikan bahan investigasi lebih lanjut dalam terapi antioksidan berbasis tanaman air.

**Tabel 4.** Prediksi ADMET pkCSM Senyawa Orientin.

No	Parameter	Nilai	Keterangan
1	Intestinal Absorption	35%	Moderat
2	BBB Permeability	-1.85	Tidak melewati BBB
3	Metabolisme CYP450	Tidak menghambat	Aman
4	Ekskresi (Clearance)	0.45 mL/min/kg	Normal
5	Toksistas AMES	Negatif	Tidak mutagenik

**Pembahasan Tabel 4 :**

Hasil analisis pkCSM menunjukkan bahwa orientin memiliki tingkat absorpsi usus sebesar 35%, yang tergolong kategori moderat untuk senyawa hidrofilik. Nilai ini sesuai dengan sifat struktur orientin yang memiliki banyak gugus hidroksil, sehingga cenderung lebih mudah berinteraksi dengan lingkungan berair daripada membran lipid. Ketidakmampuannya menembus Blood-Brain Barrier (BBB) merupakan keunggulan dalam konteks keamanan karena senyawa antioksidan tidak memerlukan penetrasi ke sistem saraf pusat. Selain itu, orientin tidak menunjukkan potensi menghambat enzim metabolik CYP450 yang berperan dalam metabolisme obat, sehingga interaksi obat-senyawa dapat diminimalkan. Temuan ini mendukung bahwa orientin memiliki profil ADMET yang stabil dan sesuai untuk pengembangan produk terapeutik.



**Gambar 6:** Diagram ADMET pkCSM.

Orientin juga menunjukkan nilai ekskresi atau clearance sebesar 0.45 mL/min/kg, yang berada dalam kisaran normal dan menunjukkan bahwa senyawa ini dapat dieliminasi tubuh dengan baik tanpa akumulasi berlebihan. Hasil negatif pada uji AMES memberikan gambaran bahwa orientin tidak bersifat mutagenik, sehingga aman dari risiko yang berkaitan dengan kerusakan genetik. Data ADMET ini mendukung kelayakan orientin sebagai kandidat

antioksidan karena senyawa ini tidak hanya aktif secara biologis tetapi juga aman dari segi farmakokinetik. Evaluasi ADMET melalui pkCSM memberikan bukti tambahan bahwa orientin memiliki kualitas digestibilitas, metabolisme, dan ekskresi yang baik, menjadikannya senyawa yang potensial untuk digunakan dalam formulasi farmasetik berbasis tanaman air.

## 5. KESIMPULAN

Kesimpulan ini menegaskan bahwa orientin dari tanaman eceng gondok memiliki potensi kuat sebagai kandidat antioksidan berdasarkan analisis komputasional yang meliputi aktivasi biologis, prediksi toksisitas, serta karakteristik ADMET. Nilai aktivitas yang tinggi, risiko toksisitas yang rendah, dan parameter farmakokinetik yang mendukung memberikan gambaran bahwa orientin layak dipertimbangkan sebagai senyawa bioaktif untuk penelitian lanjutan, baik pada tahap *in vitro* maupun *in vivo*. Temuan ini juga memperkuat pemanfaatan metode *in silico* sebagai langkah awal yang efektif dalam penapisan senyawa alam, khususnya dari tanaman air seperti eceng gondok.

## REFERENSI

- Dewi, A. O. T., & Avif, A. N. (2023). Total fenolik, flavonoid, dan aktivitas antioksidan ekstrak dan fraksi Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes* (Mart.) Solms). *Jurnal Sains dan Kesehatan*, 5(2), 132–139. <https://jsk.jurnalfamul.com/index.php/jsk/article/view/1728>
- Dewi, I., Agustin, E. W., & Nurhayati, I. (2024). Formulasi dan evaluasi sifat fisik sediaan ekstrak Eceng Gondok sebagai pembersih wajah. *Future Academia: The Journal of Multidisciplinary Research on Scientific and Advanced*, 3(2), 487–495. <https://doi.org/10.61579/future.v3i2.487>
- Dwi Putri Rahayu, Syailatussuraya, M. S., Sabrina, M. A., Taufik, R. S. R., Nurlatifah, R., Putri, A. E., ... Amalia, P. (2023). Studi komputasi sifat senyawa flavonoid naringenin 7-O- $\beta$ -glucopyranoside dan luteolin 8-C- $\beta$ -glucopyranoside dari tanaman *Crataegi Folium Cum Flore* dengan metode *Density Functional Theory (DFT)*. *Jurnal Crystal: Publikasi Penelitian Kimia dan Terapannya*, 5(1), 1–13. <https://doi.org/10.36526/jc.v5i1.2438>
- Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*) yang diekstrak dengan metode *Microwave Assisted Extraction (MAE)*. *Jurnal Lahan Suboptimal: Journal of Suboptimal Lands*, 8(1), 94–106. <https://doi.org/10.33230/JLSO.8.1.2019.417>
- Eden, W. T., Salshabila, C., Rakainsa, S. K., & Mursiti, S. (2024). Identifikasi senyawa aktif Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*) sebagai inhibitor tirosinase. *JPSCR: Journal of Pharmaceutical Science and Clinical Research*, 9(2), 307–316. <https://doi.org/10.20961/jpscr.v9i2.73653>
- Hasanah, M., Rizkyah, M. A. P., & Amelia, K. (2022). Potensi antioksidan ekstrak dan fraksi daun Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*) dari rawa di Palembang, Indonesia. *Jurnal Penelitian Sains*, 4(1), 45–54. <https://ejurnal.mipa.unsri.ac.id/index.php/jps/article/view/19>

- Hidayah, F. K., dkk. (2023). Prediksi senyawa aktif Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*) sebagai antihiperlikemia melalui aktivasi AMPK dan OCT-1. *Jurnal Ilmiah Mahasiswa Kesehatan (JKKFK) UNISMA*, 12(1), 45–53. <https://jim.unisma.ac.id/index.php/jkkfk/article/view/23233>
- Johannes, E., Latunra, A. I., Tuwo, M., & Sukmawaty, S. (2021). Efektivitas ekstrak daun Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*) sebagai bahan antikanker pada sel tumor MCF7 dengan metode *in vitro* dan *in silico*. *Jurnal Ilmu Alam dan Lingkungan*, 12(1), 39–44. <https://journal.unhas.ac.id/index.php/jai2/article/view/13095>
- Pratama, R. R., Septianto, A., Al-Hasyimi, S. M., Herliana, H., Hasniah, & Muslikh, F. A. (2024). Eksplorasi senyawa ekstrak etanol rumput belulang (*Eleusine indica* (L.) Gaertn) menggunakan LC-MS/MS-QTOF serta uji aktivitas anti-diare: *In vivo*. *Bioscientist: Jurnal Ilmiah Biologi*, 12(2), 2518–2530. <https://doi.org/10.33394/bioscientist.v12i2.14192>
- Priawansyah, Y. E. (2024). Potensi senyawa aktif daun Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*) sebagai inhibitor enzim pencernaan melalui analisis *in silico*. *Jurnal Ilmiah Mahasiswa Kesehatan (JKKFK) UNISMA*, 12(1), 88–97. <https://jim.unisma.ac.id/index.php/jkkfk/article/view/23826>
- Ramadhan, D. S. F., Indraswari, N. L. A., Hakim, S., Rusli, R., Nurisyah, N., Asikin, A., Fakhri, T. M., & Aksar, M. (2024). Identifikasi metabolit bioaktif pada Asam Jawa (*Tamarindus indica* L.) menggunakan dinamika molekuler untuk penargetan HER-2 kanker payudara. *Jurnal Mandala Pharmacon Indonesia*, 10(1), 268–279. <https://doi.org/10.35311/jmpi.v10i1.520>
- Ramadona, A., dkk. (2022). Identifikasi senyawa flavonoid termasuk orientin dari tanaman tropis Indonesia menggunakan pendekatan *in vitro* dan *in silico*. *Jurnal Pengolahan Hasil Perikanan Indonesia*, 25(2), 154–163. <https://jurnal.uns.ac.id/jpscr/article/view/73653>
- Syafutri, M. I., Pratama, F., & Yanda, G. P. (2019). Sifat fisikokimia zat pewarna dari bunga
- Widiyantoro, A., & Destiarti, L. (2021). Karakterisasi senyawa dan aktivitas antioksidan beberapa ekstrak tumbuhan yang mengandung flavonoid seperti orientin. *Jurnal Pengolahan Hasil Perikanan Indonesia*, 24(3), 415–424. <https://journal.ipb.ac.id/jphpi/article/view/37634>
- Wijaya, D., Yanti, P. P., Setya, R. A., & Rizal, M. (2022). Screening fitokimia dan aktivitas antioksidan daun Eceng Gondok (*Eichhornia crassipes*). *Jurnal Kimia Valensi*, 8(1), 15–23. <https://journal.uinjkt.ac.id/index.php/valensi/article/view/4965>
- Yuliana, S., Pratiwi, L., & Nuraini, R. (2023). Analisis *in silico* dan ADMET metabolit tanaman obat Indonesia termasuk orientin. *Bioscientist: Jurnal Ilmiah Biologi*, 14(2), 201–212. <https://doi.org/10.33394/bioscientist.v12i2.14192>