

## **Pelatihan Guru SMA: Identifikasi Potensi Rempah dan Jamu secara *In Silico***

### ***High School Teacher Training: In-Silico Identification of Potential Spices and Herb***

**Supriyanto<sup>1</sup>, Enung Siti Nurhidayah<sup>2\*</sup>, Darimiyya Hidayati<sup>3</sup>, Askur Rahman<sup>4</sup>, Banun Diyah  
Probawati<sup>5</sup>, R. Arief Firmansyah<sup>6</sup>, Iffan Maflahah<sup>7</sup>, Rakhmawati<sup>8</sup>, Muhammad Fahkry<sup>9</sup>**

<sup>1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9</sup>, Program Studi Teknologi, Fakultas Industri Pertanian, Universitas Trunojoyo Madura,  
Bangkalan, Indonesia

\*E-mail corresponding author: enung.nurhidayah@trunojoyo.ac.id

*Received: 03 Mei 2023; Revised: 24 Juni 2023; Accepted: 14 September 2023*

**Abstrak.** Peningkatan pengetahuan agroindustri jamu dan rempah sangatlah penting bagi masyarakat madura. Pengabdian masyarakat yang dilaksanakan oleh prodi TIP adalah pelatihan penggunaan software berbasis web untuk identifikasi rempah dan jamu secara in silico kepada guru kimia dan biologi SMA di Kabupaten Pamekasan. Tujuannya untuk meningkatkan literasi digital guru kimia dan biologi yang dapat mempermudah melakukan identifikasi potensi rempah dan jamu. Abdimas ini menggunakan metode pelatihan dan evaluasi kegiatan menggunakan kuesioner. Kegiatan abdimas ini sangat bermanfaat bagi guru kimia dan biologi karena dapat meningkatkan literasi digital dan dapat mempermudah melakukan identifikasi potensi rempah dan jamu dan secara umum para peserta pelatihan merasa puas dengan pelatihan ini baik dari topik, kompetensi narasumber, penyampaian materi, durasi materi maupun alat peraga pelatihan.

**Kata Kunci:** Agroindustri; Herbal; In silico; Jamu

**Abstract.** The increasing knowledge of the herbs and spices agroindustry is very important for the people of Madura. In response, the TIP study program conducted a community service through training on web-based software in silico to identify the spices and herbs for high school chemistry and biology teachers in Pamekasan Regency. Its goal is to increase the digital literacy of chemistry and biology teachers to simplify the identification of potential spices and herbs. The training and evaluation based on questionnaires are used as the method. This ABDIMAS is very useful for chemistry and biology teachers since it improves digital literacy and makes identifying the potential of spices and herbs easier. In general, the trainees are satisfied with the topic, the resource person's competence, the material's delivery, the material's duration, and the training aids provided in this event.

**Keywords:** Agroindustry; Herbs; In silico; Spices

**DOI:** 10.30653/jppm.v8i4.481



## 1. PENDAHULUAN

Indonesia sebagai negara tropis memiliki aneka ragam tanaman rempah yang sudah dimanfaatkan oleh nenek moyang sebagai bahan dasar jamu dan terus digunakan secara turun-temurun. Komoditi rempah sebagai bahan dasar jamu tersebar di seluruh pulau di Indonesia, termasuk di pulau Madura. Tanaman rempah yang dihasilkan di Madura diantaranya cabe jamu, kunyit, temulawak, laos, dan rempah lainnya (Sulastri et al., 2022). Daerah sentra produksi utama rempah yaitu Bangkalan, Sampang, Pameksan dan Sumenep (Bahrudin et al., 2021). Penggunaan obat tradisional dan rempah sebagai bahan dasar jamu merupakan salah satu kearifan lokal Madura (Mudjijono dkk., 2014). Sehingga peningkatan pengetahuan agroindustri jamu dan rempah sangatlah penting bagi masyarakat madura.

Guru merupakan garda terdepan dalam upaya peningkatan kecerdasan masyarakat. Kurikulum merdeka belajar mengamanatkan kepada guru supaya pelajar Indonesia memiliki kompetensi untuk menjadi warga negara yang demokratis, manusia unggul dan produktif di Abad ke-21 (Kemendikbud Ristek, 2021). Sehingga pelajar Indonesia dapat berpartisipasi dalam pembangunan global yang berkelanjutan. Melalui bimbingan guru para pelajar di Madura dapat mengeksplorasi segala hal tentang agroindustri rempah dan jamu, mulai dari identifikasi potensi rempah dan jamu, hingga bagaimana rempah dan jamu mempengaruhi kesejahteraan masyarakat.

Identifikasi rempah dan jamu sangat penting disampaikan kepada para siswa SMA untuk mengetahui kandungan senyawa, aktivitas biologis, efek farmakologis, mekanisme aksi, efek toksik dan pengembangan praklinis awal. Hal tersebut dapat dielaborasi pada pelajaran Kimia dan Biologi. Melakukan identifikasi suatu sampel bahan alam bukan hal mudah dan murah karena membutuhkan metode yang akurat, alat dan bahan yang cukup mahal (Weber & Kim, 2016). Sehingga karakterisasi sampel menjadi permasalahan besar bagi para peneliti bahkan ditingkat SMA pada pelajaran Kimia dan Biologi masih jarang dilakukan.

Beberapa tahun terakhir studi *in silico* mulai banyak dikembangkan sebagai metode untuk memprediksi kemampuan suatu bahan aktif dalam menimbulkan efek biologis secara komputasional dalam rangka pencarian obat baru (Zhu et al., 2018). Studi ini dikembangkan dalam rangka menekan biaya dan mengurangi lamanya proses yang dibutuhkan untuk suatu bahan aktif menjadi obat yang dapat dipasarkan ke masyarakat.

Oleh karena itu, pengabdian masyarakat yang dilaksanakan oleh program studi Teknologi Industri Pertanian (TIP) Universitas Trunojoyo Madura adalah pelatihan penggunaan *software* berbasis web untuk identifikasi potensi rempah dan jamu secara *in silico* kepada guru Kimia dan Biologi SMA di Kabupaten Pamekasan. Tujuannya untuk meningkatkan literasi digital para guru Kimia dan Biologi yang dapat mempermudah melakukan identifikasi potensi rempah dan jamu.

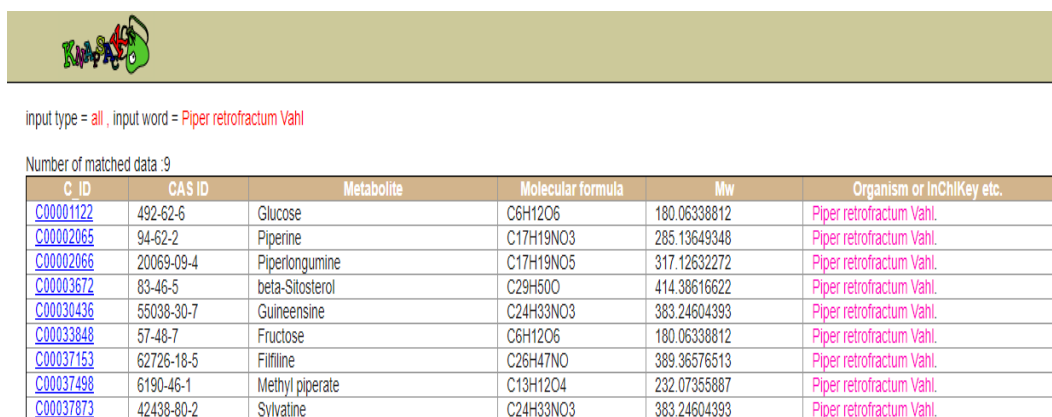
## 2. METODE

Kegiatan pengabdian masyarakat ini dilaksanakan di SMA 2 Pamekasan. Peserta merupakan guru SMA yang tergabung dalam Musyawarah Guru Mata Pelajaran (MGMP) Kimia dan Biologi. Abdimas ini dilakukan dengan metode pelatihan. Kegiatan diawali dengan penyajian materi tentang metabolit sekunder yang terkandung dalam rempah madura kemudian dilanjutkan dengan pelatihan penggunaan *software* berbasis *website* yang sudah digunakan para peneliti sebelumnya untuk melakukan identifikasi potensi rempah dan jamu sebagai obat tradisional. Di akhir kegiatan peserta diminta untuk mengisi kuesioner secara *online* sebagai evaluasi dari kegiatan pengabdian masyarakat. Peralatan yang digunakan meliputi perangkat keras dan perangkat lunak. Perangkat

keras yang digunakan adalah laptop yang dibawa oleh masing-masing peserta. Identifikasi potensi rempah dan jamu menggunakan perangkat lunak yang sudah digunakan oleh banyak peneliti sebelumnya, dapat diakses secara *online* dan gratis, yaitu *knapsack family* (Wijaya et al., 2014; Waris et al., 2022), *passonline* (Filimonov et al., 2014; Emon et al., 2022) dan *lipinski rule of five* (Amparo et al., 2021; Rivero-Segura et al., 2021).

### 3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Identifikasi rempah dan jamu dilakukan secara *in silico*, yakni perhitungan dilakukan menggunakan hukum-hukum kimia fisika dengan bantuan komputer. Tahapan yang pertama adalah melakukan identifikasi metabolit sekunder dari rempah dan jamu dengan menggunakan software *knapsack\_family* yang dapat diakses pada link ([http://www.knapsackfamily.com/KNApSAcK\\_Family/](http://www.knapsackfamily.com/KNApSAcK_Family/)). Gambar 1 merupakan hasil tangkapan layar contoh tampilan hasil indentifikasi kandungan metabolit sekunder salah satu rempah madura yaitu cabe jamu menggunakan software *knapsack\_family*. Berdasarkan hasil identifikasi tersebut bahwa cabe jamu mengandung sembilan senyawa metabolit sekunder, salah satunya adalah piperin. Hal tersebut sesuai dengan hasil penelitian (Cahyono et al. 2019) dan (Das et al. 2017) yang dilakukan secara eksperimen dengan menggunakan metode spektrofotometri dan HPLC.



input type = all , input word = Piper retrofractum Vahl

Number of matched data :9

C ID	CAS ID	Metabolite	Molecular formula	Mw	Organism or InChIKey etc.
<a href="#">C00001122</a>	492-62-6	Glucose	C6H12O6	180.06338812	<a href="#">Piper retrofractum Vahl.</a>
<a href="#">C00002065</a>	94-62-2	Piperine	C17H19NO3	285.13649348	<a href="#">Piper retrofractum Vahl.</a>
<a href="#">C00002066</a>	20069-09-4	Piperlongumine	C17H19NO5	317.12632272	<a href="#">Piper retrofractum Vahl.</a>
<a href="#">C00003672</a>	83-46-5	beta-Sitosterol	C29H50O	414.38616622	<a href="#">Piper retrofractum Vahl.</a>
<a href="#">C00030436</a>	55038-30-7	Guineensine	C24H33NO3	383.24604393	<a href="#">Piper retrofractum Vahl.</a>
<a href="#">C00033848</a>	57-48-7	Fructose	C6H12O6	180.06338812	<a href="#">Piper retrofractum Vahl.</a>
<a href="#">C00037153</a>	62726-18-5	Filifine	C26H47NO	389.36576513	<a href="#">Piper retrofractum Vahl.</a>
<a href="#">C00037498</a>	6190-46-1	Methyl piperate	C13H12O4	232.07355887	<a href="#">Piper retrofractum Vahl.</a>
<a href="#">C00037873</a>	42438-80-2	Sylvatine	C24H33NO3	383.24604393	<a href="#">Piper retrofractum Vahl.</a>

**Gambar 1.** Tangkapan layar hasil indentifikasi kandungan metabolit sekunder cabe jamu menggunakan software *knapsack\_family*

Tahap berikutnya adalah identifikasi bioaktivitas yang dimiliki oleh senyawa yang terkandung dalam rempah dan jamu yaitu menggunakan software *Passonline*. *PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances)* adalah produk perangkat lunak yang dirancang sebagai alat untuk mengevaluasi potensi biologis umum dari molekul mirip obat organik. *PASS* memberikan prediksi simultan dari berbagai jenis aktivitas biologis berdasarkan struktur senyawa organik. Dengan demikian, *PASS* dapat digunakan untuk memperkirakan profil aktivitas biologis untuk molekul virtual, sebelum sintesis kimia dan pengujian biologisnya. Perangkat lunak ini digunakan untuk memprediksi lebih dari 4000 jenis aktivitas biologis, yakni efek farmakologis, mekanisme aksi, efek toksik dan merugikan, interaksi dengan enzim metabolik dan transporter, serta pengaruh pada ekspresi gen. Aktivitas biologis suatu senyawa dapat dilipat dari nilai  $p_a$  (probability "to be active") atau  $p_i$  (probability "to be inactive"). Semakin tinggi nilai  $p_a$  dan semakin rendah nilai  $p_i$  maka aktivitas senyawa tersebut mendekati gambaran senyawa yang sedang diteliti. Software

Passonline dapat diakses secara gratis pada link (Link: <http://www.way2drug.com/passonline/index.php>). Gambar 2 merupakan tangkapan layar contoh tampilan dari hasil identifikasi bioaktivitas dari piperin yang merupakan metabolit sekunder yang terkandung dalam cabe jamu.

All 
  Pa>Pi 
  Pa>0,3 
  Pa>0,7

Pa	Pi	Activity
0,916	0,007	Membrane integrity agonist
0,826	0,003	Carminative
0,814	0,004	Neurotransmitter uptake inhibitor
0,734	0,004	Sigma receptor agonist
0,663	0,009	MAP kinase stimulant
0,648	0,027	Antidyskinetic
0,627	0,013	Ovulation inhibitor
0,609	0,010	Antiulcerative
0,575	0,019	Caspase 3 stimulant
0,572	0,027	Vasodilator, peripheral

**Gambar 2.** Tangkapan layar hasil identifikasi bioaktivitas piperin menggunakan software Passonline

Tahap terakhir adalah identifikasi praklinis awal dengan Lipinski Software. Digunakan untuk membantu dalam pengembangan praklinis awal dan dapat membantu menghindari kegagalan praklinis dan klinis tahap akhir. (Link: <http://www.scfbio-itt.res.in/software/drugdesign/lipinski.jsp>). Senyawa dari suatu bahan alam untuk bisa menjadi kandidat obat menurut Lipinski Rule of Five harus memenuhi persyaratan yaitu, berat molekul kurang 500 Dalton, nilai koefisien partisi log P kurang dari 5, jumlah donor ikatan hydrogen kurang dari 5 dan jumlah akseptor ikatan hydrogen kurang dari 10 (Lipinski, 2000). Sehingga dengan identifikasi menggunakan software ini bisa memprediksikan rempah tersebut bisa digunakan sebagai obat.

***Lipinski Rule of Five***

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

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

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

---

**Step 1: Input Drug File.**

Input PDB file  No file chosen

---

**Step 2 : Input pH Value**

pH Value  [Value ranges from 0.0 to 14.0]

---

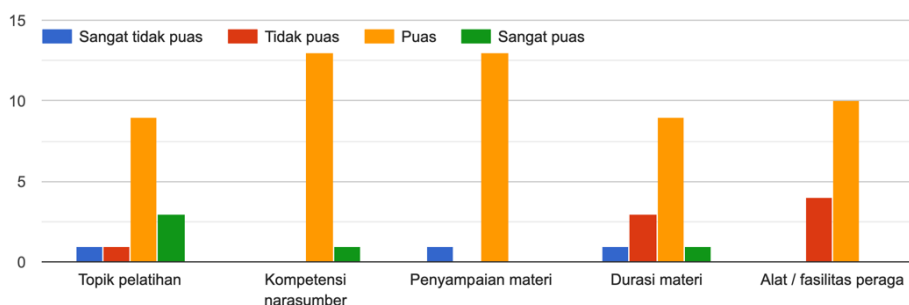
**Step 3: Click on 'Submit' to submit your job**

**Result**

mass: 285.000000  
 hydrogen bond donor: 0  
 hydrogen bond acceptors: 4  
 LOGP: 2.997199  
 Molar Refractivity: 81.169983

**Gambar 3.** Tangkapan layar hasil identifikasi praklinis awal dari senyawa piperin menggunakan software Lipinski

Pelatihan penggunaan software tersebut telah meningkatkan literasi digital para guru, sehingga sangat tertarik untuk mempelajari lebih lanjut. Karena software tersebut mudah untuk diakses serta dapat membantu para guru untuk melakukan identifikasi potensi rempah dan jamu. Selain itu, software ini dapat dijadikan media pembelajaran digital untuk pembelajaran Kimia dan Biologi. Kepuasan peserta pelatihan dapat dilihat pada Gambar 4 yang merupakan hasil kuesioner yang diisi peserta setelah mengikuti pelatihan.



**Gambar 4.** Hasil kuesioner peserta pelatihan

Berdasarkan hasil kuesioner peserta pelatihan di atas, menunjukkan bahwa secara umum peserta pelatihan merasa puas dengan pelatihan ini baik dari topik, kompetensi narasumber, penyampaian materi, durasi materi maupun alat/ fasilitas peraga pelatihan.

#### 4. SIMPULAN

Pelatihan penggunaan software berbasis web untuk identifikasi rempah dan jamu secara in silico sudah dilakukan kepada guru kimia dan biologi di Kabupaten Pamekasan. Pelatihan ini sangat bermanfaat bagi guru kimia dan biologi karena dapat meningkatkan literasi digital dan dapat mempermudah melakukan identifikasi rempah dan jamu. Para peserta merasa puas dengan kegiatan pelatihan ini dan mengharapkan kegiatan lebih lanjut yang dilakukan dengan model workshop sehingga dapat melakukan eksplorasi lebih banyak untuk identifikasi potensi rempah dan jamu.

#### UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada program studi Teknologi Industri Pertanian Universitas Trunojoyo Madura yang telah memfasilasi pendanaan kegiatan pengabdian ini. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada MGMP Kimia dan Biologi Kabupaten Pamekasan yang telah memberikan kesempatan bagi terselenggaranya kegiatan pengabdian ini.

#### REFERENSI

Amparo, Tatiane R., Janaína B. Seibert, Tamires C. Almeida, Fernanda S. F. Costa, Benila M. Silveira, Glenda N. Silva, Orlando D. H. Santos, and Gustavo H. B. Souza (2021). In Silico Approach of Secondary Metabolites from Brazilian Herbal Medicines to Search for Potential Drugs against SARS-CoV -2. *Phytotherapy Research* 35, 8, 4297–4308. <https://doi.org/10.1002/ptr.7097>.

- Bahrudin, A., Zaka, U., Sholah, Mudarris, & Aziz, A. (2021). Pemanfaatan dan Prospek Budidaya Cabe Jamu di Dusun Nung Malaka Desa Daleman Kecamatan Galis Kabupaten Bangkalan. *Jurnal Pengabdian Masyarakat*, 1(2), 108–126.
- Cahyono, B, Hasanah, EF, Judiono, Suzery, M & Widayat (2019). Analysis of piperine content in cabe jawa extracts (*Piper retrofractum* Vahl) using UV spectrophotometry and HPLC. *Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 509, 012025.
- Das, K.K. Ratha, S. Dutta, D. Mondal, & J. Hazra, (2017) Comparative pharmacognostical, phytochemical and HPLC study of some common medicinal piper species, *Int. J. Res. Ayurveda Pharm.* 7 (6). 19–24
- Emon, N.U., Alam, S., & Rudra, S. (2022). Evaluation of pharmacological potentials of the aerial part of *Achyranthes aspera* L.: in vivo, in vitro and in silico approaches. *ADV TRADIT MED (ADTM)*, 22, 141–154 <https://doi.org/10.1007/s13596-020-00528-5>
- Filimonov, D.A., Lagunin, A.A., & Glorizova, T.A. (2014). Prediction of the Biological Activity Spectra of Organic Compounds Using the Pass Online Web Resource. *Chem Heterocycl Comp*, 50, 444–457. <https://doi.org/10.1007/s10593-014-1496-1>
- Kemendikbud Ristek. (2021). *Panduan Pengembangan Projek Penguatan Profil Pelajar Pancasila. Kementerian Pendidikan Dan Kebudayaan*, 1–108.
- Lipinski, C. A. (2000). Drug-like properties and the causes of poor solubility and poor permeability. *J. Pharmacol. Toxicol. Methods*, 44, 1, 235–249.
- Mudjijono, Herawati, I., Munawaroh, S. & Sukari (2014). *Kearifan Lokal Orang Madura Tentang Jamu untuk Kesehatan Ibu dan Anak*. Yogyakarta: Balai Pelestarian Nilai Budaya
- Rivero-Segura, Nadia A., & Gomez-Verjan, J.C (2021). In Silico Screening of Natural Products Isolated from Mexican Herbal Medicines against COVID-19. *Biomolecules* 11, 2, 216. <https://doi.org/10.3390/biom11020216>.
- Sulastrri, B. A., Adiba, E. M., & Suaibah, L. (2022). Pengaruh Label Halal terhadap Pendapatan Agroindustri Obat Tradisional dan Tanaman Rempah di Madura. *Jurnal Ekonomi Dan Bisnis*, 3(2), 99–108.
- Waris, M., Engin, K., Gonulalan, E.M., Demirezer, L.O., Kır, S., & Nemutlu, E. (2022). Metabolomics Analysis Insight into Medicinal Plant Science. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 157, 116795. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2022.116795>.
- Weber, T., & Kim, H.U (2016). The secondary metabolite bioinformatics portal: Computational tools to facilitate synthetic biology of secondary metabolite production, *Synthetic and Systems Biotechnology*, 1, 69–79.
- Wijaya, S. H., Husnawati, H., Afendi, F.M., Batubara, I., Darusman, L.K., Md. Altaf-Ul-Amin, T.S, Naoaki, O., Tadao, S., & Shigehiko Kanaya (2014). Supervised Clustering Based on DPCLUSO: Prediction of Plant-Disease Relations Using Jamu Formulas of KNApSACk Database. *BioMed Research International*, 1–15. <https://doi.org/10.1155/2014/831751>.
- Zhu, F, Li, X, Yang, S, & Chen, Y (2018). Clinical success of drug targets prospectively predicted by in silico study, *Trends Pharmacol. Sci.*, 39, 229-231.