

DESAIN OBAT MODERN : INOVASI DAN ARAH BARU DALAM KIMIA MEDISINAL

Saeful Amin¹, Ridho Boogie J.K*²

^{1,2}Universitas Bakti Tunas Husada, Tasikmalaya

ridhoboogie@gmail.com

Received: 20-08-2025

Revised:03-09-2025

Approved: 25-09-2025

ABSTRACT

Penelitian ini bertujuan untuk memaparkan pendekatan dan inovasi terkini dalam desain obat berbasis kimia medisinal, dengan menitikberatkan pada peran metode komputasi serta eksplorasi senyawa alami dalam pengembangan kandidat obat baru. Melalui kajian literatur, penelitian ini mengintegrasikan temuan-temuan terbaru mengenai teknik *in silico* seperti *molecular docking*, *Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR)*, dan prediksi *Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity (ADMET)*. Hasil kajian menunjukkan bahwa strategi komputasi secara signifikan mempercepat proses penemuan obat sekaligus menurunkan biaya penelitian pada tahap awal pengembangan. Senyawa bioaktif yang berasal dari tanaman lokal seperti *Averrhoa bilimbi* (belimbing wuluh) dan *Ageratum conyzoides* (babandotan) memperlihatkan aktivitas biologis yang kuat dan berpotensi sebagai agen antikanker. Integrasi antara kimia medisinal dengan bioinformatika dan farmakogenomik memungkinkan desain obat yang lebih rasional, efisien, serta spesifik terhadap target biologis. Secara keseluruhan, penelitian ini menegaskan bahwa sinergi antara inovasi komputasional dan pemanfaatan sumber daya alam memberikan arah baru bagi pengembangan terapi modern yang berbasis bukti ilmiah dan bersifat personalisasi. Namun demikian, kajian ini masih terbatas pada analisis data sekunder dan belum disertai validasi eksperimental melalui uji *in vitro* maupun *in vivo*.

Kata Kunci: Desain Obat, Kimia Medisinal, *In Silico*, *Molecular Docking*, QSAR, ADMET

PENDAHULUAN

Kimia medisinal merupakan cabang ilmu kimia yang memiliki peran sentral dalam penemuan serta pengembangan obat melalui pendekatan rasional yang berlandaskan pada struktur molekul. Disiplin ini menelaah keterkaitan antara struktur kimia suatu molekul dengan aktivitas biologisnya, sehingga memungkinkan para peneliti untuk merancang, mensintesis, dan menyempurnakan senyawa yang memiliki potensi terapeutik tinggi[1].

Seiring meningkatnya kebutuhan akan obat-obatan yang lebih efektif dan memiliki tingkat keamanan tinggi, kimia medisinal berperan sebagai dasar utama dalam pengembangan molekul-molekul baru yang mampu berinteraksi secara spesifik dengan target biologis, seperti enzim, reseptor, maupun protein patologis yang terlibat dalam berbagai jenis penyakit, termasuk kanker, infeksi, dan gangguan metabolik[2].

Pada masa lalu, pengembangan obat dilakukan secara konvensional melalui pendekatan *trial and error*, yang sangat bergantung pada skrining biologis terhadap senyawa alami maupun hasil sintesis secara acak[3]. Meskipun pendekatan ini telah menghasilkan berbagai obat penting, prosesnya memerlukan waktu lama, biaya tinggi, dan memiliki tingkat keberhasilan yang rendah. Kondisi ini mendorong para peneliti untuk mencari metode yang lebih sistematis dan prediktif, dengan memanfaatkan kemajuan teknologi dalam komputasi dan bioinformatika[4].

Dalam pengembangan obat modern, pendekatan *in silico* menjadi strategi utama, berupa simulasi berbasis komputer yang memungkinkan prediksi awal

terhadap potensi efektivitas dan profil keamanan suatu senyawa sebelum dilakukan pengujian laboratorium. Pendekatan ini meliputi molecular docking, yang digunakan untuk menilai afinitas interaksi antara senyawa dengan target protein; Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR), yang memprediksi aktivitas biologis berdasarkan karakteristik struktural senyawa; serta prediksi ADMET untuk mengevaluasi parameter farmakokinetik dan toksikologi. Integrasi ketiga metode tersebut terbukti mampu mempercepat proses penemuan obat dan meningkatkan efisiensi dalam pemilihan kandidat senyawa potensial[5].

Salah satu keunggulan utama pendekatan *in silico* adalah kemampuannya untuk menyaring ribuan hingga jutaan senyawa dengan cepat, sekaligus mengurangi kebutuhan uji laboratorium yang mahal dan memakan waktu [6]. Hal ini sangat penting dalam pengembangan obat antikanker, karena dibutuhkan senyawa yang tidak hanya aktif secara biologis, tetapi juga aman bagi tubuh. Pendekatan ini juga memungkinkan perbaikan dan optimasi struktur molekul secara bertahap, berdasarkan data interaksi molekul dan prediksi sifat farmakologis. Di Indonesia, keanekaragaman hayati yang tinggi menjadi potensi besar untuk menemukan senyawa bioaktif dari tanaman obat. Misalnya, tanaman Belimbing Waluh (*Averrhoa bilimbi*) dan Babadotan (*Ageratum conyzoides*) telah diteliti karena mengandung senyawa fenolik dan flavonoid yang menunjukkan aktivitas biologis, termasuk potensi sebagai agen antikanker[7]. Eksplorasi senyawa dari tanaman lokal ini dapat dilakukan lebih efektif dengan teknologi molecular docking dan QSAR, yang memberikan gambaran awal mengenai potensi terapeutiknya[8].

Penelitian terkini menunjukkan bahwa senyawa-senyawa dari tanaman lokal mampu membentuk ikatan yang stabil dengan protein target yang berperan dalam perkembangan kanker, seperti HER2 (Human Epidermal Growth Factor Receptor 2) dan ER (Estrogen Receptor). Kekuatan ikatan ini ditunjukkan oleh nilai energi ikatan yang rendah serta stabilitas interaksi ligan-protein dalam simulasi komputer. Temuan ini menjadi indikasi penting bahwa senyawa alami tersebut, dengan optimasi lebih lanjut, memiliki potensi untuk dikembangkan sebagai kandidat obat yang kompetitif di tingkat global[9].

Di samping eksplorasi senyawa alami, modifikasi senyawa sintetik juga memainkan peran penting dalam pengembangan obat modern. Senyawa dasar yang telah diketahui aktivitas biologisnya dapat dimodifikasi strukturnya untuk meningkatkan potensi, selektivitas, kelarutan, dan stabilitas metabolik. Pendekatan ini sering digunakan untuk mengatasi kekurangan dari senyawa alami atau senyawa induk, serta untuk mengurangi efek samping yang tidak diinginkan. Derivat dari senyawa urea dan tiourea telah diteliti secara luas dalam upaya meningkatkan potensi antikanker. Beberapa modifikasi struktur menghasilkan senyawa yang memiliki nilai IC₅₀ lebih rendah dibandingkan senyawa standar seperti hidroksiurea. Penurunan nilai IC₅₀ menandakan peningkatan potensi inhibisi terhadap pertumbuhan sel kanker. Hal ini menunjukkan bahwa pendekatan kimia medisinal berbasis sintesis rasional memiliki kontribusi besar dalam penemuan molekul terapi yang lebih efektif. Desain obat tidak hanya fokus pada prediksi afinitas dan aktivitas biologis, tetapi juga harus mempertimbangkan aspek keamanan dan efektivitas dalam tubuh manusia. Oleh karena itu, evaluasi ADMET menjadi bagian penting di setiap tahap pengembangan. Senyawa yang menunjukkan aktivitas menjanjikan namun memiliki toksisitas tinggi atau bioavailabilitas rendah dapat disaring lebih awal, sehingga mengurangi risiko

kegagalan pada tahap uji praklinik atau klinik yang memerlukan biaya lebih besar[10].

Penelitian ini memberikan wawasan terbaru mengenai integrasi antara metode komputasi canggih dan eksplorasi senyawa alami dalam pengembangan obat berbasis kimia medisinal. Pendekatan tersebut menekankan pentingnya teknik *in silico*, seperti molecular docking, QSAR (Quantitative Structure–Activity Relationship), dan prediksi ADMET (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity), dalam mempercepat proses penemuan obat. Studi oleh [11] menunjukkan bahwa penggunaan algoritma machine learning dan optimisasi dapat meningkatkan efisiensi dalam desain obat komputasional, khususnya untuk pengembangan inhibitor kinase. Di sisi lain, senyawa alami tetap menjadi sumber penting bagi penemuan obat baru. Penelitian oleh [12] menegaskan bahwa produk alami memiliki kerangka kimia yang beragam serta kompleksitas struktural tinggi, yang dapat dimanfaatkan dalam desain obat sintetik. Dengan menggabungkan pendekatan komputasional dan eksplorasi senyawa alami, penelitian ini menawarkan strategi yang efektif untuk mempercepat dan meningkatkan efisiensi proses penemuan obat.

Dengan demikian, pendekatan desain obat berbasis kimia medisinal saat ini menjadi paradigma utama dalam pengembangan terapi baru. Integrasi antara data kimia, biologi, dan komputasi memungkinkan terciptanya sistem yang lebih rasional, efisien, dan terukur dalam menghadapi tantangan kesehatan modern. Indonesia, dengan kekayaan hayati yang melimpah serta perkembangan teknologi yang pesat, memiliki potensi besar untuk memberikan kontribusi signifikan dalam pengembangan obat di kancah global, khususnya melalui penelitian yang memadukan pendekatan kimia medisinal, sumber daya alam lokal, dan teknologi komputasi.

METODE PENELITIAN

Penelitian ini menerapkan pendekatan kualitatif melalui tinjauan pustaka sistematis (systematic literature review) untuk mengidentifikasi serta menganalisis kemajuan terkini dalam desain obat berbasis kimia medisinal. Pengumpulan data dilakukan dengan menelusuri database ilmiah bereputasi, seperti Scopus, PubMed, ScienceDirect, dan SpringerLink, menggunakan kata kunci antara lain: “computational drug design”, “medicinal chemistry”, “*in silico* methods”, “natural product drug discovery”, dan “pharmacogenomics integration”. Seleksi artikel didasarkan pada kriteria inklusi, yaitu artikel jurnal yang diterbitkan dalam lima tahun terakhir (2020–2024), relevan dengan topik, dan memiliki akses penuh ke teks lengkap. Sebaliknya, artikel yang bersifat duplikatif, tidak mencantumkan metode secara jelas, atau tidak fokus pada pengembangan obat dikeluarkan dari kajian[13].

Analisis data dilakukan secara tematik dengan menggabungkan pendekatan deduktif dan induktif, mencakup klasifikasi tren metodologi, penerapan teknologi komputasi seperti molecular docking, QSAR, dan prediksi ADMET, serta pemanfaatan senyawa alami dalam pengembangan kandidat obat. Selanjutnya, peneliti menyusun sintesis naratif untuk mengintegrasikan temuan dari berbagai studi, menekankan hubungan antara teknik *in silico* dan kemajuan dalam kimia medisinal. Untuk memastikan validitas kajian, proses ekstraksi data dilakukan oleh dua penelaah independen dan hasilnya diselaraskan melalui diskusi panel guna meminimalkan potensi bias interpretative

RESULTS AND DISCUSSION

Pendekatan berbasis kimia medisinal memegang peran penting dalam proses penemuan dan pengembangan obat modern. Integrasi metode komputasi seperti molecular docking, QSAR, ADMET prediction, dan modifikasi struktur senyawa memungkinkan analisis interaksi molekul secara efisien serta prediksi aktivitas biologis dan profil farmakokinetik kandidat obat. Pendekatan-pendekatan tersebut memberikan dasar rasional dalam identifikasi senyawa potensial dengan afinitas tinggi terhadap target biologis. Rangkuman metode dan temuan utama penelitian ini disajikan pada Tabel 1 berikut.

Tabel 1. Pendekatan Desain Obat dan Temuannya

Pendekatan	Fungsi Utama	Temuan Penting
<i>Molecular Docking</i>	Perkiraan atau penentuan afinitas interaksi antara senyawa dan protein target	Senyawa yang berasal dari tanaman Babandotan dan Belimbing Wuluh membentuk interaksi yang stabil dengan protein HER2 dan ER.
<i>QSAR</i>	Prediksi aktivitas biologis berdasarkan struktur molekul	Senyawa 1-(4-tert-butylbenzoiloksi)urea menunjukkan IC50 sebesar 59,15 µg/mL, yang lebih rendah dan lebih kuat dibandingkan hidroksiurea dengan IC50 430,21 µg/mL.
<i>ADMET Prediction</i>	Penilaian terhadap profil keamanan dan potensi efektivitas senyawa	Nilai LD50 > 2800 mg/kg, tidak toksik terhadap CYP2D6
<i>Modifikasi Struktur Sintetik</i>	Meningkatkan kelarutan, selektivitas, dan efektivitas	Modifikasi senyawa menghasilkan rerank score lebih baik dan ikatan lebih stabil

Sumber: Data penelitian (2024)

Desain obat modern semakin memanfaatkan pendekatan komputasi untuk meningkatkan efisiensi dan ketepatan dalam penemuan senyawa kandidat. Salah satu metode yang diterapkan dalam penelitian ini adalah molecular docking, yaitu teknik simulasi yang memprediksi interaksi antara senyawa (ligan) dan protein target. Dengan menggunakan struktur tiga dimensi protein target, seperti HER2 dan ER yang terkait dengan kanker payudara, molecular docking memungkinkan analisis kekuatan dan orientasi ikatan antara senyawa dan kantong aktif protein tersebut[14]. Hasil studi menunjukkan bahwa senyawa dari tanaman *Averrhoa bilimbi* dan *Ageratum conyzoides* membentuk interaksi stabil dengan kedua protein target, ditunjukkan oleh rerank score yang rendah. Nilai ini menggambarkan energi bebas ikatan yang rendah, menandakan afinitas tinggi dan potensi kemampuan senyawa untuk menghambat aktivitas biologis protein target.

Selain analisis interaksi secara umum, molecular docking juga memberikan informasi mengenai jenis ikatan yang terbentuk, seperti ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik, dan gaya elektrostatik. Interaksi ini penting untuk mengidentifikasi residu kunci pada protein yang terlibat dalam pengikatan ligan, sekaligus menjadi panduan awal dalam optimasi struktur senyawa[15].

Hasil docking menunjukkan bahwa senyawa alami yang diuji mampu membentuk berbagai interaksi non-kovalen dengan residu aktif protein HER2 dan ER, menandakan potensinya sebagai agen terapeutik. Temuan ini membuka peluang bagi pengembangan obat berbasis bahan alam dari biodiversitas Indonesia, yang masih jarang dieksplorasi secara sistematis[16]. Metode lain yang diterapkan dalam penelitian ini adalah Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR), yaitu pendekatan prediktif yang menghubungkan sifat kimia-fisika suatu molekul dengan aktivitas biologisnya[17]. Dalam studi ini, QSAR digunakan untuk membangun model matematis yang memprediksi potensi aktivitas senyawa berdasarkan karakteristik strukturnya, seperti logP, polar surface area, volume molekul, dan energi HOMO-LUMO. Hasil QSAR menunjukkan bahwa turunan urea, yaitu 1-(4-tert-butylbenzoyloxy) urea, memiliki aktivitas yang lebih tinggi dibandingkan hidroksiurea, dibuktikan dengan IC_{50} yang jauh lebih rendah, yaitu 59,15 $\mu\text{g/mL}$ dibandingkan 430,21 $\mu\text{g/mL}$ pada hidroksiurea.

Peningkatan aktivitas senyawa ini sangat dipengaruhi oleh keberadaan gugus t-butyl yang bersifat hidrofobik, sehingga meningkatkan afinitas senyawa terhadap protein target. Selain itu, cincin aromatik dalam struktur senyawa juga berperan dalam memperkuat stabilitas interaksi dengan situs aktif protein. Melalui pendekatan QSAR, parameter struktural seperti ini dapat dianalisis untuk memahami kontribusinya terhadap aktivitas biologis. Dengan demikian, QSAR tidak hanya berguna untuk menyaring senyawa potensial, tetapi juga sebagai panduan dalam merancang turunan baru yang lebih efektif, dengan memodifikasi bagian-bagian struktur yang memberikan kontribusi positif terhadap aktivitas[18].

Evaluasi terhadap aspek farmakokinetik dan toksikologi senyawa dilakukan melalui prediksi ADMET. Pendekatan ini menjadi sangat penting karena banyak senyawa yang secara *in vitro* menunjukkan aktivitas tinggi, namun gagal dalam uji praklinik atau klinik akibat profil toksisitas yang buruk atau bioavailabilitas yang rendah. Dalam penelitian ini, senyawa yang diuji menunjukkan nilai LD_{50} lebih dari 2800 mg/kg, yang dikategorikan sebagai tidak toksik dalam parameter toksikologi akut. Selain itu, senyawa tersebut tidak menunjukkan penghambatan terhadap enzim CYP2D6, yang merupakan enzim penting dalam metabolisme obat. Ketidakterlibatan dalam inhibisi CYP2D6 berarti senyawa tersebut memiliki risiko rendah untuk menimbulkan interaksi obat yang merugikan.

Parameter lain dalam prediksi ADMET, seperti kelarutan dalam air, permeabilitas membran, dan kemampuan menembus blood-brain barrier, juga dianalisis dalam penelitian ini. Senyawa dengan logP moderat dan ukuran molekul yang tepat memiliki peluang lebih tinggi untuk diserap secara oral dan mencapai target terapi secara sistemik. Profil farmakokinetik yang baik ini memperkuat potensi senyawa sebagai kandidat obat yang layak dikembangkan lebih lanjut.

Prediksi ADMET sejak tahap awal desain obat sangat penting untuk mengurangi risiko kegagalan klinis yang mahal. Pengembangan lebih lanjut dilakukan melalui modifikasi struktur sintetik, dengan tujuan meningkatkan efektivitas senyawa dengan menyesuaikan bagian tertentu dari molekul agar lebih sesuai dengan kantong aktif protein target. Dalam studi ini, modifikasi struktur menghasilkan rerank score yang lebih baik dan interaksi yang lebih stabil dalam simulasi docking ulang, menunjukkan bahwa perubahan struktur berdampak positif pada afinitas dan selektivitas senyawa. Beberapa modifikasi, seperti penambahan gugus polar, penggantian gugus aromatik, dan pengurangan

hambatan sterik, terbukti meningkatkan profil interaksi dan potensi aktivitas biologis senyawa[17].

Keunggulan pendekatan sintesis rasional terletak pada kemampuannya untuk secara sistematis meningkatkan berbagai parameter farmakologis senyawa, termasuk kelarutan, bioavailabilitas, dan stabilitas metabolik. Selain itu, senyawa yang telah dimodifikasi dapat diuji ulang menggunakan QSAR dan prediksi ADMET untuk memastikan bahwa perubahan struktur tidak hanya meningkatkan aktivitas, tetapi juga mempertahankan atau memperbaiki profil keamanan senyawa. Proses iteratif yang melibatkan desain, simulasi, sintesis, dan evaluasi ini menjadi inti dari kimia medisinal modern[19].

Integrasi tiga metode utama Molecular Docking, QSAR, dan prediksi ADMET dalam penelitian ini memberikan gambaran menyeluruh mengenai potensi senyawa sebelum memasuki tahap uji laboratorium [14] Dengan memadukan ketiga pendekatan tersebut, peneliti dapat menyaring senyawa-senyawa menjanjikan dari ratusan hingga ribuan kandidat, sekaligus memprioritaskan senyawa yang tidak hanya aktif, tetapi juga aman dan memiliki profil farmakokinetik yang baik. Strategi ini membantu mempercepat proses pengembangan obat, mengurangi biaya, dan meningkatkan tingkat keberhasilan pada tahap pengembangan selanjutnya[20].

Hasil penelitian ini menekankan pentingnya pemanfaatan biodiversitas lokal dalam pengembangan obat. Indonesia, dengan keanekaragaman hayatinya yang luas, masih menyimpan banyak senyawa bioaktif yang belum tereksplorasi. Dengan penerapan teknologi desain obat berbasis kimia medisinal, potensi tanaman lokal seperti Belimbing Wuluh dan Babandotan dapat dikembangkan secara ilmiah menjadi kandidat terapi baru yang relevan, baik untuk kebutuhan domestik maupun pasar global. Penelitian ini menjadi contoh nyata bagaimana ilmu pengetahuan modern dapat mengubah sumber daya alam menjadi produk farmasi bernilai tinggi.

Secara keseluruhan, pendekatan desain obat berbasis kimia medisinal menawarkan peluang besar untuk mempercepat penemuan senyawa terapeutik unggul. Melalui integrasi teknologi komputasi dan eksplorasi bahan alam, proses penemuan obat menjadi lebih efisien, akurat, dan berbasis data. Studi ini menunjukkan bahwa metode *in silico* tidak hanya berfungsi sebagai alat bantu, tetapi juga sebagai kerangka utama dalam pengembangan obat masa depan. Oleh karena itu, peningkatan kapasitas riset, infrastruktur, dan kolaborasi antar lembaga menjadi kunci untuk memaksimalkan potensi pengembangan obat berbasis kimia medisinal di Indonesia.

KESIMPULAN

Kimia medisinal modern, melalui penerapan metode *in silico* seperti molecular docking, QSAR, dan prediksi ADMET, telah menjadi pendekatan yang rasional dan efisien dalam penemuan serta pengembangan obat. Hasil penelitian ini mengindikasikan bahwa senyawa dari tanaman lokal, seperti *Averrhoa bilimbi* dan *Ageratum conyzoides*, memiliki potensi sebagai agen antikanker dengan kemampuan interaksi yang kuat terhadap protein target HER2 dan ER. Selain itu, modifikasi struktur senyawa sintetik, seperti turunan urea, berhasil meningkatkan aktivitas biologis dan profil farmakokinetik, menunjukkan bahwa pendekatan terintegrasi ini efektif dalam menyaring serta mengoptimalkan senyawa dengan

efektivitas dan keamanan yang tinggi. Temuan ini menegaskan bahwa integrasi antara ilmu dasar, teknologi komputasi, dan pemanfaatan sumber daya alam lokal dapat menjadi landasan yang kuat untuk pengembangan obat masa depan yang lebih cepat, cost-effective, dan berbasis bukti ilmiah.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] H. N. Agus, A. S. R., Purnaningtyas, S. R. D., Wahidin, Sari, D. R. T., Ischak, N. I., Gianti, L., & Cahyanto, *Editor : La Ode Alifariki, S. Kep., Ns., M. Kes.* 2024.
- [2] A. S. Izzaturahmi *et al.*, "Indonesian Journal of Biological Pharmacy In Silico Study of Licorice (*Glycyrrhiza glabra* L.) on VEGFR-2 Receptors in Breast Cancer," *Indones. J. Biol. Pharm.*, vol. 3, no. 3, pp. 137–153, 2023, [Online]. Available: <https://jurnal.unpad.ac.id/ijbp>
- [3] S. Amin, R. A. Azhari, F. R. Nurmaliya, L. Pujawati⁴, S. Hamidah, and M. L. Sopiyyurrohman, "Peran Kimia Medisinal dalam Pengembangan Obat Antikanker: Kajian Literatur tentang Senyawa Bioaktif dari Sumber Alam," *J. Ners*, vol. 9, no. 2, pp. 2987–2992, 2025, doi: 10.31004/jn.v9i2.44578.
- [4] S. L. B. Gultom, Ma. Naziha, and S. Efendi, "Kimia Organik dan Industri Farmasi Pengembangan Obat Berbasis," *J. Pendidik. Tambusai*, vol. 9, no. 1, pp. 2426–2430, 2025.
- [5] R. Hadanu and M. Sitorus, "Modeling of Benzimidazole Derivatives as Antimalarial Agents using QSAR Analysis," *Makara J. Sci.*, vol. 28, no. 3, pp. 264–275, 2024, doi: 10.7454/mss.v28i3.2238.
- [6] K. N. Mishra, M. Rashmi, and H. C. Upadhyay, "Coumarin-1,2,3-Triazole Hybrids as Promising Antibacterial Agents: In silico Molecular Docking, ADMET and Molecular Dynamics Simulation Studies (Exploring in silico Antibacterial Potential of Coumarin-1,2,3-triazoles)," *Indian J. Pharm. Educ. Res.*, vol. 58, no. 4, pp. 1242–1254, 2024, doi: 10.5530/ijper.58.4.137.
- [7] S. Amin. and F. Meithasari., "Peran Kimia Medisinal Dalam Pengembangan Obat Antikanker," *Indones. J. Sci.*, vol. 1, no. 6, pp. 1321–1333, 2025.
- [8] M. Aarjane, A. Aouidate, S. Slassi, and A. Amine, "Synthesis, antibacterial evaluation, in silico ADMET and molecular docking studies of new N-acylhydrazone derivatives from acridone," *Arab. J. Chem.*, vol. 13, no. 7, pp. 6236–6245, 2020, doi: 10.1016/j.arabjc.2020.05.034.
- [9] Siswandono, "Peran Kimia Medisinal Dalam Pengembangan Dan Penemuan Obat Baru," *Peran Kim. Med. Dalam Pengemb. Dan Penemuan Obat Baru*, pp. 10–11, 2004.
- [10] A. Kadan, K. Ryczko, E. Lloyd, A. Roitberg, and T. Yamazaki, "Guided multi-objective generative AI to enhance structure-based drug design," *Chem. Sci.*, vol. 16, no. 29, pp. 13196–13210, 2025, doi: 10.1039/d5sc01778e.
- [11] S. Choudhuri *et al.*, "Recent Advancements in Computational Drug Design Algorithms through Machine Learning and Optimization," *Kinases and Phosphatases*, vol. 1, no. 2, pp. 117–140, 2023, doi: 10.3390/kinasesphosphatases1020008.
- [12] L. Quintieri, L. Caputo, and O. Nicolotti, "Recent Advances in the Discovery of Novel Drugs on Natural Molecules," *Biomedicines*, vol. 12, no. 6, pp. 1–6, 2024, doi: 10.3390/biomedicines12061254.
- [13] L. Affengruber *et al.*, "Characteristics and recovery methods of studies falsely excluded during literature screening—a systematic review," *Syst. Rev.*, vol.

- 11, no. 1, pp. 1–10, 2022, doi: 10.1186/s13643-022-02109-w.
- [14] S. Amin, Z. A. Z. Hurry, T. A. Sumantri, and R. A. Fauzi, “Studi Komputasional Senyawa Flavonoid Tanaman Obat sebagai Kandidat Agen Antidiabetik,” *J. Ilmu Medis Indones.*, vol. 4, no. 1, pp. 21–40, 2024, doi: 10.35912/jimi.v4i1.4553.
- [15] D. Utami, R. Syahputra, and W. Widyaningsih, “Studi Docking Molekular Aktivitas Penghambatan Enzim Tirosinase Ubi Jalar (*Ipomoea batatas* L. Lam),” *Pharmacon J. Farm. Indones.*, vol. 19, no. 1, pp. 21–34, 2022, doi: 10.23917/pharmacon.v19i1.18295.
- [16] S. Amin, S. Mustafidah, N. S. Nabila, and C. Maharani, “Review Artikel: Pendekatan *in Silico* dalam Kimia Medisinal tentang Resistensi Antibiotik,” *J. Ilmu Medis Indones.*, vol. 4, no. 1, pp. 83–91, 2024, doi: 10.35912/jimi.v4i1.4561.
- [17] S. Amin, R. N. Azijah, and F. R. Gunawan, “Eksplorasi Senyawa Alami sebagai Lead Antikanker Payudara dengan Pendekatan *In Silico*,” *J. Ilmu Medis Indones.*, vol. 4, no. 1, pp. 63–74, 2024, doi: 10.35912/jimi.v4i1.4560.
- [18] A. P. Asmara, R. S. Nasution, and R. Minarty, “QSAR Modeling of Compounds Derived from 1,2,3-Triazolopiperidine as DPP-4 Enzyme Inhibitors Using Semiempirical AM1,” *JKPK (Jurnal Kim. dan Pendidik. Kim.)*, vol. 5, no. 1, p. 70, 2020, doi: 10.20961/jkpk.v5i1.28358.
- [19] F. A. Maziyyuna, A. Kumar, and P. Kumar, “Synthesis, docking studies, ADMET prediction, and antimicrobial evaluation of coumarin-oxadiazole hybrids,” *Thai J. Pharm. Sci.*, vol. 46, no. 5, pp. 588–594, 2022, doi: 10.56808/3027-7922.2643.
- [20] S. Amin, G. T. Supriatna, M. I. Ardian, and M. I. Abdurrahman, “Potensi Senyawa Turunan Terpenoid sebagai Agen Anti-Kanker,” *J. Ilmu Medis Indones.*, vol. 4, no. 1, pp. 53–61, 2024, doi: 10.35912/jimi.v4i1.4551.