



Anderson Arnold Aloanis
Vlagia Indira Paat
Suleman Duengo
Jabes Wolter Kanter

BIOAKTIVITAS SENYAWA

**DASAR TEORI DAN PENDEKATAN
KOMPUTASIONAL**

BIOAKTIVITAS SENYAWA: DASAR TEORI DAN PENDEKATAN KOMPUTASIONAL

Anderson Arnold Aloanis
Vlagia Indira Paat
Suleman Duengo
Jabes Wolter Kanter



Tahta Media Group

UU No 28 tahun 2014 tentang Hak Cipta

Fungsi dan sifat hak cipta Pasal 4

Hak Cipta sebagaimana dimaksud dalam Pasal 3 huruf a merupakan hak eksklusif yang terdiri atas hak moral dan hak ekonomi.

Pembatasan Pelindungan Pasal 26

Ketentuan sebagaimana dimaksud dalam Pasal 23, Pasal 24, dan Pasal 25 tidak berlaku terhadap:

- i. penggunaan kutipan singkat Ciptaan dan/atau produk Hak Terkait untuk pelaporan peristiwa aktual yang ditujukan hanya untuk keperluan penyediaan informasi aktual;
- ii. Penggandaan Ciptaan dan/atau produk Hak Terkait hanya untuk kepentingan penelitian ilmu pengetahuan;
- iii. Penggandaan Ciptaan dan/atau produk Hak Terkait hanya untuk keperluan pengajaran, kecuali pertunjukan dan Fonogram yang telah dilakukan Pengumuman sebagai bahan ajar; dan
- iv. penggunaan untuk kepentingan pendidikan dan pengembangan ilmu pengetahuan yang memungkinkan suatu Ciptaan dan/atau produk Hak Terkait dapat digunakan tanpa izin Pelaku Pertunjukan, Produser Fonogram, atau Lembaga Penyiaran.

Sanksi Pelanggaran Pasal 113

1. Setiap Orang yang dengan tanpa hak melakukan pelanggaran hak ekonomi sebagaimana dimaksud dalam Pasal 9 ayat (1) huruf i untuk Penggunaan Secara Komersial dipidana dengan pidana penjara paling lama 1 (satu) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp100.000.000 (seratus juta rupiah).
2. Setiap Orang yang dengan tanpa hak dan/atau tanpa izin Pencipta atau pemegang Hak Cipta melakukan pelanggaran hak ekonomi Pencipta sebagaimana dimaksud dalam Pasal 9 ayat (1) huruf c, huruf d, huruf f, dan/atau huruf h untuk Penggunaan Secara Komersial dipidana dengan pidana penjara paling lama 3 (tiga) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp500.000.000,00 (lima ratus juta rupiah).

Hak cipta dilindungi undang-undang

Dilarang keras menerjemahkan, memfotokopi, atau memperbanyak sebagian atau seluruh isi buku ini tanpa izin tertulis dari Penerbit.

BIOAKTIVITAS SENYAWA: DASAR TEORI DAN PENDEKATAN KOMPUTASIONAL

Penulis:

Anderson Arnold Aloanis

Vlagia Indira Paat

Suleman Duengo

Jabes Wolter Kanter

Desain Cover:

Tahta Media

Editor:

Tahta Media

Proofreader:

Tahta Media

Ukuran:

ix, 238, Uk: 15,5 x 23 cm

ISBN: 978-634-262-304-6

Cetakan Pertama:

September 2026

Hak Cipta 2026, Pada Penulis

Isi diluar tanggung jawab percetakan

Copyright © 2026 by Tahta Media Group

All Right Reserved

PENERBIT TAHTA MEDIA GROUP

Perumahan Mitra Utama Residence 3 Blok A no 1, Sawahan, Tempel,
Kec. Gatak, Kabupaten Sukoharjo, Jawa Tengah 57557

email: tahtaliterasimedia@gmail.com

website: <http://store.tahtamedia.co.id/>

Anggota IKAPI (216/JTE/2021)

KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Tuhan Yang Maha Esa atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga buku referensi yang berjudul “Bioaktivitas Senyawa: Dasar Teori dan Pendekatan Komputasional” dapat diselesaikan dengan baik. Buku ini disusun sebagai salah satu upaya untuk menyediakan sumber belajar dan referensi ilmiah yang komprehensif mengenai penerapan metode komputasional dalam penelitian bioaktivitas senyawa, khususnya dalam bidang kimia, farmasi, bioteknologi, bioinformatika, dan penemuan obat (*drug discovery*).

Perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi, terutama di bidang komputasi, telah membawa perubahan besar dalam cara para peneliti memahami hubungan antara struktur molekul dan aktivitas biologis. Jika sebelumnya proses identifikasi kandidat senyawa bioaktif sangat bergantung pada eksperimen laboratorium yang memerlukan waktu dan biaya yang besar, saat ini berbagai metode komputasional mampu mempercepat proses tersebut melalui pendekatan yang lebih efisien dan sistematis. Metode-metode seperti *Quantitative Structure-Activity Relationship* (QSAR), *Molecular Docking*, *Molecular Dynamics*, *Virtual Screening*, prediksi ADMET, serta penerapan *Artificial Intelligence* telah menjadi bagian penting dalam penelitian bioaktivitas modern. Buku ini disusun untuk memberikan pemahaman yang terintegrasi mengenai berbagai pendekatan komputasional tersebut, mulai dari konsep dasar hingga penerapannya dalam penelitian bioaktivitas senyawa. Pembahasan di dalam buku tidak hanya mencakup aspek teoritis, tetapi juga disertai contoh penerapan, studi kasus, target protein yang umum digunakan, platform analisis berbasis web, serta strategi integrasi berbagai metode komputasional dalam penemuan kandidat obat baru. Dengan

demikian, pembaca diharapkan dapat memahami tidak hanya bagaimana suatu metode bekerja, tetapi juga bagaimana metode tersebut digunakan secara bersama-sama dalam suatu alur penelitian yang komprehensif.

Buku ini ditujukan bagi mahasiswa sarjana, magister, dan doktoral, dosen, peneliti, serta praktisi yang memiliki minat dalam bidang kimia komputasi, kimia medis, farmasi, ilmu hayati, dan bioinformatika. Materi yang disajikan diharapkan dapat menjadi referensi dalam kegiatan perkuliahan, penelitian, maupun pengembangan keilmuan yang berfokus pada eksplorasi dan analisis senyawa bioaktif. Penulis menyadari bahwa buku ini masih memiliki berbagai keterbatasan dan belum sepenuhnya mencakup seluruh perkembangan terbaru yang berlangsung sangat cepat di bidang komputasi dan kecerdasan buatan. Oleh karena itu, kritik, saran, dan masukan yang konstruktif sangat diharapkan untuk penyempurnaan buku ini pada edisi berikutnya.

Akhir kata, penulis berharap buku ini dapat memberikan manfaat yang luas bagi pengembangan ilmu pengetahuan, khususnya dalam mendukung penelitian bioaktivitas senyawa berbasis komputasional dan mendorong lahirnya inovasi-inovasi baru dalam bidang kesehatan, farmasi, dan penemuan obat.

Penulis

Anderson Arnold Aloanis

PRAKATA

Perkembangan ilmu pengetahuan pada abad ke-21 ditandai oleh semakin kuatnya integrasi antara sains dasar, teknologi informasi, dan komputasi. Dalam bidang kimia, farmasi, dan ilmu hayati, kemajuan tersebut telah mengubah paradigma penelitian dari pendekatan yang sepenuhnya eksperimental menuju pendekatan yang terintegrasi dengan metode komputasional. Saat ini, bioaktivitas senyawa tidak lagi hanya bergantung pada pengujian laboratorium, tetapi juga didukung oleh berbagai teknik komputasi yang mampu memprediksi aktivitas biologis, interaksi molekuler, sifat farmakokinetik, hingga potensi toksisitas suatu senyawa secara lebih cepat dan efisien.

Buku “Bioaktivitas Senyawa: Dasar Teori dan Pendekatan Komputasional” disusun sebagai respons terhadap kebutuhan akan sumber referensi yang membahas secara sistematis dan komprehensif berbagai metode komputasional yang digunakan dalam penelitian bioaktivitas. Materi yang disajikan mencakup konsep dasar bioaktivitas senyawa, deskriptor molekul dan QSAR, *Molecular Docking*, *Molecular Dynamics*, *Virtual Screening*, prediksi ADMET, penerapan Machine Learning dan Artificial Intelligence, berbagai platform analisis berbasis web, hingga strategi integrasi metode komputasional dalam penemuan kandidat obat baru.

Penyusunan buku ini didasarkan pada perkembangan terkini di bidang *Computer-Aided Drug Design* (CADD), bioinformatika, dan kimia komputasi, serta diperkaya dengan berbagai hasil penelitian dan pengalaman akademik penulis dalam bidang sintesis senyawa bioaktif, peptida bioaktif, dan studi *in silico*. Oleh karena itu, buku ini tidak hanya menghadirkan landasan teoritis, tetapi juga memberikan contoh-contoh praktis yang dapat digunakan sebagai panduan dalam penelitian maupun pembelajaran.

Kami berharap buku ini dapat menjadi referensi bagi mahasiswa, dosen, peneliti, dan praktisi yang ingin memahami serta menerapkan metode komputasional dalam bioaktivitas senyawa. Selain itu, buku ini diharapkan mampu mendukung pengembangan penelitian multidisiplin yang menghubungkan kimia, farmasi, biologi, bioinformatika, dan kecerdasan buatan dalam upaya menemukan senyawa bioaktif yang lebih efektif, aman, dan inovatif. Penyusunan buku ini tentu tidak terlepas dari berbagai keterbatasan. Oleh karena itu, kami sangat terbuka terhadap kritik dan saran yang membangun demi penyempurnaan isi buku pada masa yang akan datang. Semoga buku ini dapat memberikan kontribusi positif bagi pengembangan ilmu pengetahuan dan menjadi salah satu rujukan yang bermanfaat dalam bidang analisis bioaktivitas senyawa berbasis komputasional.

Penulis

Anderson Arnold Aloanis

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR.....	iv
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI.....	viii
BAB 1 PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang Bioaktivitas Senyawa	1
B. Pentingnya Pendekatan Komputasional dalam Bioaktivitas ...	2
BAB 2 DASAR-DASAR BIOAKTIVITAS SENYAWA	6
A. Definisi dan Konsep Bioaktivitas	7
B. Klasifikasi Senyawa Berdasarkan Aktivitas Biologis	8
C. Prinsip Interaksi Senyawa dan Target Biologi	72
BAB 3 PENDEKATAN KOMPUTASIONAL DALAM BIOAKTIVITAS	76
A. Peran Komputasi dalam Penemuan Obat Modern.....	76
B. Keunggulan dan Keterbatasan Metode Komputasi.....	79
C. Alur Kerja Analisis Komputasional	82
BAB 4 <i>QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP</i> (QSAR)	86
A. Konsep Dasar QSAR	87
B. Jenis-jenis Deskriptor Molekul.....	89
C. Metode Statistik dan Validasi Model QSAR.....	92
D. Penerapan QSAR dalam Bioaktivitas	98
E. Studi Kasus QSAR.....	102
BAB 5 <i>MOLECULAR DOCKING</i>	107
A. Prinsip Dasar <i>Docking</i> Molekul.....	108
B. Persiapan Struktur Ligand dan Target	114
C. Algoritma dan <i>Scoring</i> Fungsi dalam <i>Docking</i>	121
D. Interpretasi Hasil <i>Docking</i>	128

BAB 6 MOLECULAR DYNAMICS (MD).....	134
A. Dasar Teori Simulasi Dinamika Molekul	135
E. Persiapan Sistem Simulasi	140
F. Analisis Trajektori dan Interpretasi Data MD	146
G. Penerapan MD dalam Studi Bioaktivitas	158
BAB 7 METODE KOMPUTASIONAL LAIN DALAM	
BIOAKTIVITAS	164
A. <i>Pharmacophore Modeling</i>	165
B. <i>Virtual Screening</i>	171
C. <i>ADMET Prediction (Absorption, Distribution, Metabolism,</i> <i>Excretion, Toxicity)</i>	176
F. <i>Machine Learning</i> dan <i>Artificial Intelligence</i> dalam Bioaktivitas	183
G. AI dalam Analisis Data Omics.....	188
H. Keunggulan dan Keterbatasan AI dalam Bioaktivitas	188
I. Masa Depan Artificial Intelligence dalam Penemuan Obat .	189
J. Analisis Komputasional berbasis web	189
BAB 8 INTEGRASI DAN STRATEGI MENGANALISIS	
BIOAKTIVITAS	203
A. <i>Workflow</i> Kombinasi Berbagai Metode Komputasional	204
B. Studi Kasus Integratif.....	213
C. Tantangan dan Peluang di Masa Depan	219
DAFTAR PUSTAKA	225
GLOSARIUM	231
PROFIL PENULIS.....	237

BAB 1

PENDAHULUAN

A. LATAR BELAKANG BIOAKTIVITAS SENYAWA

Bioaktivitas senyawa merupakan fondasi penting dalam pengembangan ilmu kimia, biologi, dan farmasi yang mendalami pengaruh senyawa terhadap sistem biologis secara spesifik. Dalam sejarah perkembangannya, penelitian terhadap bioaktivitas telah menjadi jembatan penghubung antara disiplin kimia dan biologi molekuler, di mana pemahaman tentang interaksi molekul dan organisme membuka peluang besar untuk penemuan obat, pestisida, maupun senyawa bioaktif lain yang bermanfaat bagi kehidupan manusia. Seiring bertambahnya kebutuhan akan terapi yang lebih spesifik dan efektif, penemuan senyawa baru yang memiliki potensi bioaktivitas semakin menjadi prioritas utama. Senyawa-senyawa ini dapat berasal dari alam maupun hasil sintesis laboratorium, dan masing-masing harus melalui serangkaian uji bioaktivitas untuk menentukan efektivitas serta keamanannya. Proses analisis ini tidak hanya melibatkan pengujian secara eksperimen, tetapi juga pemanfaatan data historis dan kecerdasan buatan untuk mempercepat penemuan senyawa unggulan.

Metodologi analisis bioaktivitas berkembang pesat seiring kemajuan teknologi. Mulai dari screening awal melalui uji *in vitro*, dilanjutkan dengan analisis *in vivo*, hingga pendekatan komputasional yang mampu memprediksi interaksi senyawa dengan target biologis secara lebih efisien. Pendekatan komputasi telah

membuka peluang baru dalam riset, memungkinkan peneliti untuk mensimulasikan interaksi molekul dan memperkirakan potensi bioaktivitas sebelum dilakukan riset laboratorium yang memakan waktu dan biaya besar.

Melalui analisis bioaktivitas, para peneliti dapat mengidentifikasi senyawa-senyawa yang berpotensi tinggi untuk dikembangkan menjadi obat atau produk bioaktif lainnya. Analisis ini juga berperan dalam menyeleksi dan mengeliminasi senyawa yang tidak memenuhi standar bioaktivitas, sehingga proses penemuan dan pengembangan senyawa menjadi lebih efisien. Dengan demikian, penggunaan sumber daya dan waktu dapat ditekan secara signifikan.

Selain untuk penemuan obat, pemahaman terhadap bioaktivitas senyawa menjadi krusial dalam pengembangan produk pertanian, pengelolaan lingkungan, serta aplikasi bioteknologi lainnya. Misalnya, senyawa bioaktif dapat digunakan sebagai agen antimikroba alami, pestisida ramah lingkungan, atau bahan dasar untuk terapi inovatif yang menjawab tantangan kesehatan modern. Dengan pendekatan analisis yang semakin terintegrasi dan berbasis teknologi, diharapkan inovasi di bidang bioaktivitas senyawa dapat memberikan manfaat luas bagi masyarakat dan kemajuan ilmu pengetahuan. Kerangka ini menjadi landasan bagi penelitian selanjutnya, menegaskan pentingnya analisis yang komprehensif dan multidisiplin demi menjawab kebutuhan zaman yang semakin kompleks dan dinamis.

B. PENTINGNYA PENDEKATAN KOMPUTASIONAL DALAM BIOAKTIVITAS

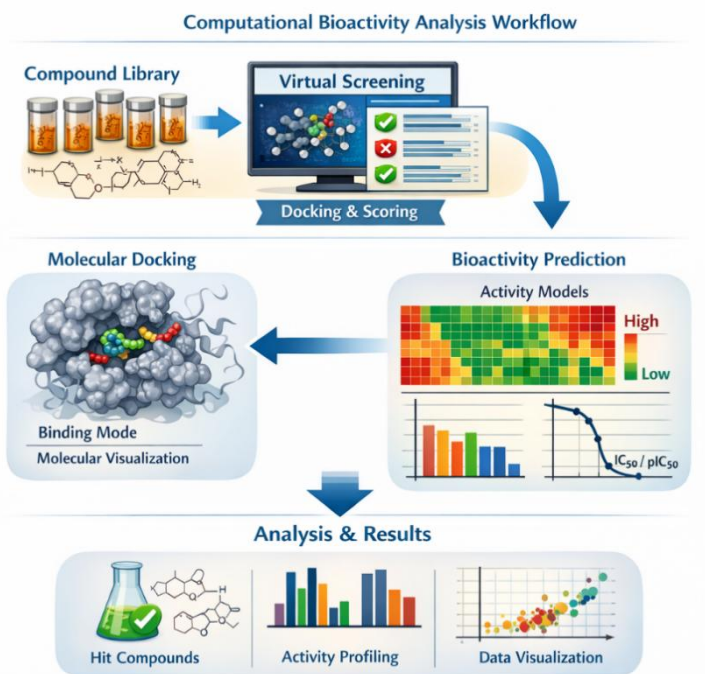
Pendekatan komputasional dalam analisis bioaktivitas senyawa merupakan metode yang memanfaatkan teknologi komputer dan algoritma canggih untuk memahami, memprediksi, serta

mengevaluasi interaksi antara senyawa kimia dan sistem biologis. Metode ini hadir sebagai solusi inovatif di tengah kebutuhan akan proses analisis yang lebih cepat, akurat, dan efisien dalam penelitian biologi molekuler, farmasi, maupun bioteknologi. Dengan mengintegrasikan data molekuler, struktur senyawa, dan model biologis, pendekatan komputasional mampu memberikan gambaran yang mendalam mengenai potensi bioaktivitas sebelum dilakukan uji laboratorium secara langsung.

Salah satu keunggulan utama pendekatan komputasional adalah efisiensi waktu dan sumber daya. Metode ini memungkinkan peneliti untuk melakukan screening ribuan hingga jutaan senyawa secara virtual, sehingga proses seleksi dapat dilakukan tanpa harus menghabiskan biaya dan tenaga untuk eksperimen fisik yang sering kali memakan waktu lama. Selain itu, komputasi menawarkan tingkat akurasi yang tinggi dalam memprediksi kemungkinan interaksi molekul dengan target biologis, berkat kemajuan algoritma dan kecerdasan buatan yang mampu mengidentifikasi pola-pola kompleks dalam data bioaktivitas.

Dalam konteks penemuan dan pengembangan obat modern, pendekatan komputasional memainkan peran yang sangat penting. Melalui teknik seperti molecular docking, simulasi dinamika molekul, dan machine learning, peneliti dapat mengidentifikasi senyawa kandidat yang memiliki peluang besar untuk menjadi obat baru. Proses ini tidak hanya mempercepat penemuan obat, tetapi juga meningkatkan kemungkinan keberhasilan dalam tahap pengembangan dengan mengurangi risiko kegagalan akibat senyawa yang tidak efektif atau berpotensi toksik. Integrasi database bioaktivitas dan model prediksi juga membantu dalam mengoptimalkan desain senyawa farmasi yang lebih spesifik dan aman.

Integrasi antara pendekatan komputasional dan eksperimen laboratorium menjadi kunci dalam menghasilkan hasil yang valid dan dapat diandalkan. Hasil prediksi dari komputasi digunakan sebagai panduan awal untuk memilih senyawa yang layak diuji secara *in vitro* maupun *in vivo*. Dengan demikian, pendekatan ini tidak menggantikan eksperimen, melainkan melengkapi dan memperkuat proses riset dengan memberikan data yang lebih terarah. Kolaborasi antara ahli komputer, kimia, dan biologi sangat diperlukan agar hasil analisis komputasional dapat diterjemahkan secara tepat dalam konteks biologis nyata.



Gambar 1.1. alur kerja pendekatan komputasional untuk senyawa bioaktif

Meski memiliki banyak keunggulan, pendekatan komputasional juga menghadapi sejumlah tantangan dan keterbatasan. Validitas model sangat bergantung pada kualitas data dan pemahaman terhadap mekanisme biologis yang kompleks. Beberapa prediksi masih perlu diverifikasi melalui uji laboratorium untuk memastikan keakuratan dan relevansi hasil. Selain itu, keterbatasan perangkat keras, software, serta kemampuan interpretasi hasil menjadi aspek yang harus terus ditingkatkan. Solusi yang dapat dilakukan adalah dengan memperbarui model secara berkala, memperluas database bioaktivitas, serta meningkatkan kolaborasi multidisiplin dalam pengembangan algoritma dan teknologi komputasi.

Dampak pendekatan komputasional terhadap pengembangan ilmu pengetahuan sangat signifikan. Metode ini telah membuka peluang baru dalam riset bioaktivitas, mempercepat inovasi di bidang obat, pertanian, dan bioteknologi. Prospek ke depan menunjukkan bahwa pendekatan komputasional akan semakin terintegrasi dengan teknologi big data dan kecerdasan buatan, sehingga mampu menghadirkan analisis yang lebih komprehensif, prediktif, dan adaptif terhadap kebutuhan zaman. Dengan demikian, mahasiswa dan peneliti sains di Indonesia dapat memanfaatkan pendekatan ini untuk menjawab tantangan riset yang semakin kompleks dan dinamis.

BAB 2

DASAR-DASAR BIOAKTIVITAS SENYAWA

Bab ini membahas dasar-dasar bioaktivitas senyawa sebagai fondasi penting dalam memahami bagaimana suatu senyawa dapat mempengaruhi sistem biologis. Pengetahuan mengenai bioaktivitas sangat krusial, khususnya dalam konteks penemuan obat, pengembangan bahan aktif pertanian, maupun aplikasi bioteknologi lainnya. Pada bab ini, pembaca akan diajak untuk menelusuri konsep dan definisi bioaktivitas secara komprehensif, sehingga dapat membedakan antara aktivitas biologis yang spesifik dan nonspesifik.

Selain itu, bab ini menguraikan klasifikasi senyawa berdasarkan aktivitas biologisnya, seperti senyawa yang bersifat antimikroba, antiinflamasi, antikanker, atau senyawa yang memiliki aktivitas ganda. Klasifikasi ini membantu dalam penentuan strategi penelitian lebih lanjut dan pemilihan model biologis yang sesuai. Tidak hanya itu, prinsip-prinsip interaksi antara senyawa dan target biologi juga dibahas secara mendalam, mulai dari aspek pengikatan molekul hingga mekanisme aksi di tingkat seluler dan molekuler. Dengan memahami interaksi ini, pembaca diharapkan mampu mengidentifikasi faktor-faktor yang memengaruhi efektivitas dan selektivitas suatu senyawa.

Dengan cakupan materi tersebut, bab ini menjadi landasan penting sebelum memasuki pendekatan komputasional yang lebih

lanjut. Pemahaman dasar-dasar bioaktivitas akan memudahkan dalam melakukan analisis, interpretasi, serta pengembangan senyawa dengan aktivitas biologis yang diharapkan, sehingga penelitian maupun aplikasi praktis di bidang sains dan teknologi dapat berjalan lebih terarah dan efektif.

A. DEFINISI DAN KONSEP BIOAKTIVITAS

Bioaktivitas adalah kemampuan suatu senyawa untuk menimbulkan respons atau efek tertentu pada sistem biologis, baik pada tingkat sel, jaringan, organ, maupun organisme secara keseluruhan. Sifat ini menjadi indikator utama dalam menentukan potensi suatu senyawa sebagai bahan aktif yang dapat digunakan dalam bidang kesehatan, pertanian, dan bioteknologi. Secara umum, bioaktivitas dapat diartikan sebagai potensi atau sifat molekul untuk mempengaruhi proses fisiologis dan biokimia pada makhluk hidup. Pengaruh ini dapat berupa stimulasi, inhibisi, atau modifikasi fungsi biologis, sehingga memberikan dampak pada keseimbangan dan mekanisme kerja sistem tubuh.

Konsep bioaktivitas sangat erat kaitannya dengan interaksi spesifik antara senyawa dan target biologis, misalnya enzim, reseptor, atau asam nukleat. Interaksi ini menentukan tingkat efektivitas dan selektivitas aksi senyawa, serta menjadi dasar bagi penentuan strategi penelitian lanjut dalam pengembangan senyawa farmasi atau bahan aktif lainnya. Pemahaman terhadap bioaktivitas sangat penting dalam proses penemuan obat dan pengembangan bahan aktif pertanian. Dengan mengetahui mekanisme aksi dan target biologis yang relevan, peneliti dapat mengidentifikasi dan memilih senyawa yang memiliki peluang lebih besar untuk memberikan manfaat terapeutik atau fungsional. Hanya senyawa yang menunjukkan bioaktivitas relevan

yang layak dikaji lebih lanjut dalam penelitian maupun aplikasi praktis. Hal ini menegaskan perlunya analisis mendalam terhadap aspek bioaktivitas sebelum suatu senyawa diimplementasikan dalam bidang sains dan teknologi, agar hasilnya lebih terarah dan efektif dalam menjawab tantangan riset masa kini.

B. KLASIFIKASI SENYAWA BERDASARKAN AKTIVITAS BIOLOGIS

Pemahaman mengenai bioaktivitas senyawa merupakan fondasi penting dalam analisis farmakologis modern, terutama ketika pendekatan komputasional digunakan untuk memetakan interaksi molekuler dan memprediksi potensi terapeutik. Senyawa bioaktif tidak hanya dibedakan berdasarkan struktur kimianya, tetapi juga berdasarkan aktivitas biologis yang muncul dari interaksi mereka dengan target biomolekuler tertentu. Aktivitas ini dapat berupa penghambatan enzim, modulasi jalur sinyal, perlindungan sel dari stres oksidatif, hingga pengaturan respons imun. Delapan artikel yang dianalisis dalam buku ini memberikan gambaran luas mengenai keragaman aktivitas biologis senyawa alami dari berbagai sumber—tanaman obat, mikroalga, buah-buahan, hingga senyawa pangan. Melalui pendekatan seperti *molecular docking*, *molecular dynamics*, *QSAR modeling*, *ADMET prediction*, dan *toxicity modeling*, aktivitas biologis tersebut dapat dipetakan secara sistematis. Dari keseluruhan temuan tersebut, senyawa-senyawa bioaktif dapat diklasifikasikan ke dalam enam kelompok besar aktivitas biologis yang paling relevan dalam penemuan obat berbasis komputasi.

DAFTAR PUSTAKA

- Abraham, M.J., Murtola, T., Schulz, R., Páll, S., Smith, J.C., Hess, B. and Lindahl, E., 2015. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. *SoftwareX*, 1-2, pp.19-25.
- ADMETlab, 2026. *ADMETlab 3.0*. Available at: <https://admetlab3.scbdd.com> [Accessed 17 July 2026].
- Ain, Q.U., Aleksandrova, A., Roessler, F.D. and Ballester, P.J., 2015. Machine-learning scoring functions to improve structure-based binding affinity prediction and virtual screening. *WIREs Computational Molecular Science*, 5(6), pp.405-424.
- Aloanis, A.A. and Paat, V.I., 2024. *Buku Bahan Ajar Senyawa Bioaktif*. Yogyakarta: Tahta Media.
- Aloanis, A.A. and Paat, V.I., 2024. *Sintesis Siklopeptida*. Yogyakarta: Tahta Media.
- Aloanis, A.A., Herlina, T., Hardianto, A. and Maharani, R., 2024. Total synthesis of Cyclosenegalin A. *ChemistryOpen*, 13(12), p.e202400175.
- Aloanis, A.A. and Paat, V.I., 2025. *Peptida Antimikroba*. Yogyakarta: Tahta Media.
- Aloanis, A.A. and Paat, V.I., 2025. *Reaksi-Reaksi Senyawa Organik*. Yogyakarta: Tahta Media.
- Aloanis, A.A., Paat, V.I. and Katuuk, D., 2025. *Buku Ajar Sintesis Organik Jilid I*. Yogyakarta: Tahta Media.
- Aloanis, A.A., Herlina, T., Hardianto, A. and Maharani, R., 2025. Structural design and synthesis of Cyclosenegalin A analogue. *Journal of Heterocyclic Chemistry*, 62(9), pp.781-790.

- Aloanis, A.A., Najoan, J.M.J., Paat, V.I., Rumengan, S.M. and Rumampuk, R.J., 2025. Total synthesis and molecular docking study of peptide AWVDY as an anti-inflammatory agent. *JKPK (Jurnal Kimia dan Pendidikan Kimia)*, 10(2), pp.234-254.
- Aloanis, A.A., Paat, V.I. and Duengo, S., 2026. Total synthesis and potential bioactivity of linear peptide LSAVTPG. *Fullerene Journal of Chemistry*, 11(2), pp.86-93.
- Bender, A. and Cortés-Ciriano, I., 2021. Artificial intelligence in drug discovery: What is realistic, what are illusions? *Drug Discovery Today*, 26(2), pp.511-524.
- CB-Dock, 2026. *CB-Dock Web Server*. Available at: <https://cadd.labshare.cn/cb-dock2> [Accessed 17 July 2026].
- ChEMBL, 2026. *ChEMBL Database*. Available at: <https://www.ebi.ac.uk/chembl> [Accessed 17 July 2026].
- Daina, A., Michielin, O. and Zoete, V., 2017. SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports*, 7, p.42717.
- DAVID Bioinformatics Resources, 2026. *Database for Annotation, Visualization and Integrated Discovery*. Available at: <https://davidbioinformatics.nih.gov/workspace.html> [Accessed 17 July 2026].
- DockThor, 2026. *DockThor Virtual Screening and Docking Platform*. Available at: <https://dockthor.lncc.br/v2/> [Accessed 17 July 2026].
- DrugBank, 2026. *DrugBank Online*. Available at: <https://go.drugbank.com> [Accessed 17 July 2026].
- Fu, L., Shi, S., Yi, J., Wang, N., He, Y., Wu, Z., Peng, J., Deng, Y., Wang, W. and Wu, C., 2024. ADMETlab 3.0: An updated comprehensive online ADMET prediction platform enhanced

- with broader coverage, improved performance, API functionality and decision support. *Nucleic Acids Research*, 52(W1), pp.W422-W431.
- Guedes, I.A., de Magalhães, C.S. and Dardenne, L.E., 2014. Receptor-ligand molecular docking. *Biophysical Reviews*, 6(1), pp.75-87.
- Irwin, J.J., Tang, K.G., Young, J., Dandarchuluun, C., Wong, B.R., Khurelbaatar, M., Moroz, Y.S., Mayfield, J. and Sayle, R.A., 2020. ZINC20—A free ultralarge-scale chemical database for ligand discovery. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 60(12), pp.6065-6073. Available at: <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c00675>.
- Kitchen, D.B., Decornez, H., Furr, J.R. and Bajorath, J., 2004. Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: Methods and applications. *Nature Reviews Drug Discovery*, 3(11), pp.935-949.
- Koirala, M., Yan, L., Mohamed, Z. and DiPaola, M., 2025. AI-integrated QSAR modeling for enhanced drug discovery: From classical approaches to deep learning and structural insight. *International Journal of Molecular Sciences*, 26(19), p.9384.
- Lakasan, A.C., Duengo, S., Musa, W.J.A., Aloanis, A.A. and Botutihe, D.N., 2026. In silico study of the antidiabetic potential of alkaloid compounds from the roots of *Acalypha indica*: Molecular docking and ADMET prediction. *Jurnal Farmasimed (JFM)*, 8(2), pp.740-750.
- Leach, A.R., 2001. *Molecular Modelling: Principles and Applications*. 2nd ed. Harlow: Pearson Education.
- Lionta, E., Spyrou, G., Vassilatis, D.K. and Cournia, Z., 2014. Structure-based virtual screening for drug discovery: Principles, applications and recent advances. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 14(16), pp.1923-1938.

- Lipinski, C.A., Lombardo, F., Dominy, B.W. and Feeney, P.J., 2001. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 46(1-3), pp.3-26.
- Metascape, 2026. *Metascape Gene Annotation and Analysis Resource*. Available at: <https://metascape.org> [Accessed 17 July 2026].
- Morris, G.M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M.F., Belew, R.K., Goodsell, D.S. and Olson, A.J., 2009. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility. *Journal of Computational Chemistry*, 30(16), pp.2785-2791.
- Najoan, J.M.J., Rumampuk, R.J., Paat, V.I. and Aloanis, A.A., 2025. In silico study of the YAKRCFR peptide structure and its interaction with human Peroxiredoxin-5. *Jurnal Beta Kimia*, 5(2), pp.1-8.
- Paat, V.I., Aloanis, A.A. and Najoan, J.M.J., 2025. Molecular docking of Cyclosporin A as anticancer agent. *Fullerene Journal of Chemistry*, 10(1), pp.26-33.
- PASS Online, 2026. *Prediction of Activity Spectra for Substances*. Available at: [Way2Drug - PASS Online](#) [Accessed 17 July 2026].
- Pantsar, T. and Poso, A., 2018. Binding affinity via docking: Fact and fiction. *Molecules*, 23(8), p.1899.
- Patrick, G.L., 2017. *An Introduction to Medicinal Chemistry*. 6th ed. Oxford: Oxford University Press.
- Phillips, J.C., Braun, R., Wang, W., Gumbart, J., Tajkhorshid, E., Villa, E. and Schulten, K., 2005. Scalable molecular dynamics with NAMD. *Journal of Computational Chemistry*, 26(16), pp.1781-1802.

- Pires, D.E.V., Blundell, T.L. and Ascher, D.B., 2015. pkCSM: Predicting small-molecule pharmacokinetic and toxicity properties using graph-based signatures. *Journal of Medicinal Chemistry*, 58(9), pp.4066-4072.
- Protein Data Bank (PDB), 2026. *RCSB Protein Data Bank*. Available at: <https://www.rcsb.org> [Accessed 17 July 2026].
- PubChem, 2026. *PubChem Database*. Available at: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> [Accessed 17 July 2026].
- SeamDock, 2026. *SeamDock Online Docking Platform*. Available at: <https://bioserv.rpbs.univ-paris-diderot.fr/services/SeamDock/> [Accessed 17 July 2026].
- Silverman, R.B. and Holladay, M.W., 2014. *The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action*. 3rd ed. London: Academic Press.
- Sliwoski, G., Kothiwale, S., Meiler, J. and Lowe, E.W., 2014. Computational methods in drug discovery. *Pharmacological Reviews*, 66(1), pp.334-395.
- STRING, 2026. *STRING Database*. Available at: <https://string-db.org> [Accessed 17 July 2026].
- SwissADME, 2026. *SwissADME*. Available at: <https://www.swissadme.ch> [Accessed 17 July 2026].
- SwissTargetPrediction, 2026. *SwissTargetPrediction*. Available at: <http://www.swisstargetprediction.ch> [Accessed 17 July 2026].
- Trott, O. and Olson, A.J., 2010. AutoDock Vina: Improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading. *Journal of Computational Chemistry*, 31(2), pp.455-461.
- Van Der Spoel, D., Lindahl, E., Hess, B., Groenhof, G., Mark, A.E. and Berendsen, H.J.C., 2005. GROMACS: Fast, flexible, and free. *Journal of Computational Chemistry*, 26(16), pp.1701-1718.

- Wang, N.N., Dong, J., Deng, Y.H., Zhu, M.F., Wen, M., Yao, Z.J., Lu, A.P., Chen, A.F. and Cao, D.S., 2019. ADMETlab: A platform for systematic ADMET evaluation based on a comprehensively collected ADMET database. *Journal of Cheminformatics*, 11(1), pp.1-11.
- Yang, H., Lou, C., Sun, L., Li, J., Cai, Y., Wang, Z., Li, W., Liu, G. and Tang, Y., 2019. admetSAR 2.0: Web-service for prediction and optimization of chemical ADMET properties. *Bioinformatics*, 35(6), pp.1067-1069.
- ZINC Database, 2026. ZINC20 Chemical Database. Available at: <https://zinc.docking.org> [Accessed 17 July 2026].
- Zoete, V., Daina, A., Bovigny, C. and Michielin, O., 2016. SwissSimilarity: A web tool for low to ultra-high throughput ligand-based virtual screening. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 56(8), pp.1399-1404.

GLOSARIUM

Absorption

Proses masuknya senyawa atau obat ke dalam sirkulasi sistemik setelah pemberian melalui rute tertentu.

ADMET (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity)

Pendekatan komputasional untuk memprediksi sifat farmakokinetik dan toksikologi suatu senyawa.

Affinity (Afinitas)

Tingkat kekuatan interaksi atau kecenderungan suatu ligan untuk berikatan dengan target biologis.

Algorithm (Algoritma)

Serangkaian langkah matematis atau komputasional yang digunakan untuk menyelesaikan suatu permasalahan.

Artificial Intelligence (AI)

Cabang ilmu komputer yang memungkinkan sistem komputer melakukan tugas yang menyerupai kecerdasan manusia, seperti belajar, mengenali pola, dan membuat prediksi.

Binding Affinity

Ukuran kekuatan pengikatan antara ligan dan protein target.

Binding Site

Daerah spesifik pada protein yang menjadi lokasi pengikatan ligan.

Bioaktivitas

Kemampuan suatu senyawa untuk menghasilkan efek biologis pada organisme hidup.

Bioavailability

Persentase senyawa yang mencapai sirkulasi sistemik dalam bentuk aktif setelah pemberian.

Bioinformatics

Bidang ilmu yang menggabungkan biologi, statistik, dan komputasi untuk menganalisis data biologis.

Computer-Aided Drug Design (CADD)

Pendekatan komputasional yang digunakan untuk mempercepat proses penemuan dan pengembangan obat.

Consensus Scoring

Metode evaluasi docking yang menggabungkan beberapa fungsi skoring untuk meningkatkan akurasi prediksi.

Descriptor Molekul

Representasi numerik yang menggambarkan karakteristik fisikokimia, struktural, atau elektronik suatu molekul.

Docking Score

Nilai yang dihasilkan dari simulasi docking untuk menggambarkan kualitas interaksi protein–ligan.

Drug-Likeness

Karakteristik molekul yang menunjukkan kesesuaiannya untuk dikembangkan menjadi kandidat obat.

Ensemble

Kumpulan kondisi termodinamika tertentu yang digunakan dalam simulasi molecular dynamics.

Force Field

Kumpulan persamaan dan parameter yang digunakan untuk menghitung energi dan gaya antaratom dalam simulasi molekuler.

Gene Ontology (GO)

Sistem klasifikasi yang digunakan untuk mendeskripsikan fungsi biologis gen dan protein.

Hydrogen Bond (Ikatan Hidrogen)

Interaksi nonkovalen antara atom donor hidrogen dan atom akseptor elektron yang berperan penting dalam stabilitas kompleks biomolekuler.

In Silico

Pendekatan penelitian yang dilakukan menggunakan simulasi atau analisis berbasis komputer.

Lead Compound

Senyawa yang menunjukkan aktivitas biologis menjanjikan dan berpotensi dikembangkan lebih lanjut menjadi obat.

Ligand (Ligan)

Molekul yang dapat berinteraksi atau berikatan dengan target biologis, seperti protein atau reseptor.

Lipinski's Rule of Five

Aturan yang digunakan untuk memperkirakan kelayakan suatu molekul sebagai obat oral.

Machine Learning

Cabang kecerdasan buatan yang memungkinkan komputer belajar dari data untuk membuat prediksi atau keputusan.

Metabolism

Proses transformasi kimia suatu senyawa dalam tubuh, umumnya oleh enzim.

Molecular Dynamics (MD)

Metode simulasi komputasional yang mempelajari pergerakan atom dan molekul sebagai fungsi waktu.

Molecular Docking

Metode komputasional untuk memprediksi orientasi dan afinitas pengikatan ligan terhadap protein target.

Network Pharmacology

Pendekatan yang mempelajari interaksi antara senyawa, target biologis, dan jalur molekuler dalam suatu sistem biologis.

Pharmacophore

Susunan fitur molekuler penting yang diperlukan untuk menghasilkan aktivitas biologis tertentu.

Protein Data Bank (PDB)

Basis data internasional yang menyimpan struktur tiga dimensi protein dan biomolekul lainnya.

QSAR (Quantitative Structure–Activity Relationship)

Metode yang menghubungkan struktur molekul dengan aktivitas biologis menggunakan model matematis dan statistik.

Radius of Gyration (Rg)

Parameter yang digunakan untuk mengevaluasi tingkat kekompakan struktur molekul selama simulasi.

Receptor (Reseptor)

Protein yang dapat mengenali dan berinteraksi dengan ligan tertentu sehingga menghasilkan respons biologis.

Root Mean Square Deviation (RMSD)

Parameter yang digunakan untuk mengukur perubahan struktur keseluruhan selama simulasi molecular dynamics.

Root Mean Square Fluctuation (RMSF)

Parameter yang digunakan untuk mengukur fleksibilitas masing-masing residu asam amino selama simulasi.

Scoring Function

Model matematis yang digunakan untuk memperkirakan energi pengikatan antara protein dan ligan.

Structure-Based Drug Design (SBDD)

Pendekatan desain obat yang memanfaatkan informasi struktur tiga dimensi target biologis.

Target Protein

Protein yang menjadi sasaran interaksi suatu senyawa bioaktif atau obat.

Virtual Screening

Metode komputasional untuk menyaring sejumlah besar senyawa guna menemukan kandidat yang berpotensi aktif secara biologis.

PROFIL PENULIS



Anderson Arnold Aloanis

Anderson Arnold Aloanis merupakan dosen pada Program Studi Kimia, Universitas Negeri Manado sejak tahun 2015. Sebagai akademisi yang mengabdikan diri dalam bidang pendidikan tinggi, beliau aktif melaksanakan tridarma perguruan tinggi yang meliputi pendidikan dan pengajaran, penelitian, serta pengabdian kepada masyarakat. Dalam upaya meningkatkan kompetensi profesional sebagai dosen, beliau secara berkelanjutan mengikuti berbagai pelatihan, workshop, seminar, dan kegiatan pengembangan kapasitas yang berkaitan dengan pembelajaran, penelitian, publikasi ilmiah, serta pengembangan inovasi di bidang kimia. Bidang minat penelitian yang ditekuni meliputi kimia organik, sintesis senyawa bioaktif, peptida bioaktif, kimia komputasi, dan berbagai pendekatan *in silico* dalam analisis bioaktivitas senyawa. Beliau aktif melakukan penelitian yang dipublikasikan pada berbagai jurnal nasional maupun internasional serta berkolaborasi dalam pengembangan riset multidisiplin yang mengintegrasikan kimia, farmasi, dan bioinformatika. Selain menghasilkan berbagai artikel ilmiah, beliau juga aktif menulis buku ajar dan buku referensi di bidang kimia, di antaranya *Buku Bahan Ajar Senyawa Bioaktif*, *Sintesis Siklopeptida*, *Peptida Antimikroba*, *Reaksi-Reaksi Senyawa Organik*, dan *Buku Ajar Sintesis Organik Jilid I*. Melalui berbagai karya tersebut, beliau berupaya memberikan kontribusi nyata dalam pengembangan ilmu kimia dan peningkatan kualitas pembelajaran di perguruan tinggi. Email: andersonaloanis@unima.ac.id



Vlagia Indira Paat, M.Si merupakan dosen di Program Studi Kimia Fakultas Matematika, Ilmu Pengetahuan Alam, dan Kebumihan Universitas Negeri Manado. Lahir di Kota Tomohon, 14 November 1989. Ia menyelesaikan pendidikan program Sarjana (S1) di Universitas Negeri Manado Program studi Kimia dan menyelesaikan pendidikan magister (S2) di Universitas Padjadjaran Bandung program studi Kimia konsentrasi Kimia Analitik.



Jabes Wolter Kanter, S.Si., M.Kes. merupakan dosen pada Program Studi Farmasi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Kristen Indonesia Tomohon. Bidang keahliannya meliputi farmasi, bioteknologi, mikrobiologi, kimia bahan alam, serta pengembangan dan pengujian aktivitas biologis bahan alam. Ia aktif dalam kegiatan penelitian dan publikasi ilmiah, khususnya terkait pemanfaatan bahan alam sebagai sumber senyawa bioaktif dan antibakteri.



Dr. Suleman Duengo, S.Pd., M.Si. merupakan dosen dan Lektor pada Program Studi Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Gorontalo. Beliau menyelesaikan pendidikan doktoral di bidang Ilmu Kimia dan aktif dalam penelitian serta publikasi ilmiah, khususnya pada bidang kimia organik, sintesis senyawa, dan kimia bahan alam. Beliau juga aktif dalam kegiatan pengabdian kepada masyarakat dan pengembangan keilmuan kimia.

BIOAKTIVITAS SENYAWA

DASAR TEORI DAN PENDEKATAN KOMPUTASIONAL

Perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi, terutama di bidang komputasi, telah membawa perubahan besar dalam cara para peneliti memahami hubungan antara struktur molekul dan aktivitas biologis. Jika sebelumnya proses identifikasi kandidat senyawa bioaktif sangat bergantung pada eksperimen laboratorium yang memerlukan waktu dan biaya yang besar, saat ini berbagai metode komputasional mampu mempercepat proses tersebut melalui pendekatan yang lebih efisien dan sistematis. Metode-metode seperti Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR), Molecular Docking, Molecular Dynamics, Virtual Screening, prediksi ADMET, serta penerapan Artificial Intelligence telah menjadi bagian penting dalam penelitian bioaktivitas modern. Buku ini disusun untuk memberikan pemahaman yang terintegrasi mengenai berbagai pendekatan komputasional tersebut, mulai dari konsep dasar hingga penerapannya dalam penelitian bioaktivitas senyawa. Pembahasan di dalam buku tidak hanya mencakup aspek teoritis, tetapi juga disertai contoh penerapan, studi kasus, target protein yang umum digunakan, platform analisis berbasis web, serta strategi integrasi berbagai metode komputasional dalam penemuan kandidat obat baru. Dengan demikian, pembaca diharapkan dapat memahami tidak hanya bagaimana suatu metode bekerja, tetapi juga bagaimana metode tersebut digunakan secara bersama-sama dalam suatu alur penelitian yang komprehensif.

Buku ini ditujukan bagi mahasiswa sarjana, magister, dan doktoral, dosen, peneliti, serta praktisi yang memiliki minat dalam bidang kimia komputasi, kimia medis, farmasi, ilmu hayati, dan bioinformatika. Materi yang disajikan diharapkan dapat menjadi referensi dalam kegiatan perkuliahan, penelitian, maupun pengembangan keilmuan yang berfokus pada eksplorasi dan analisis senyawa bioaktif. Penulis menyadari bahwa buku ini masih memiliki berbagai keterbatasan dan belum sepenuhnya mencakup seluruh perkembangan terbaru yang berlangsung sangat cepat di bidang komputasi dan kecerdasan buatan. Oleh karena itu, kritik, saran, dan masukan yang konstruktif sangat diharapkan untuk penyempurnaan buku ini pada edisi berikutnya.



CV. Tahta Media Group

Sukoharjo, Jawa Tengah

Web : www.tahtamedia.co.id

Ig : tahtamedia group

Telp/WA : +62 896 5427 3996

