

# Studi Biokomputasi Aktivitas Senyawa-Senyawa Bahan Alam

**Topan Setiawan**

<sup>1</sup>Program Studi Pendidikan Kimia, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan.  
Universitas Khairun, Kota Ternate, Maluku Utara, Indonesia.

<sup>1</sup>Email: [topan@unkhair.ac.id](mailto:topan@unkhair.ac.id)

## Informasi Jurnal

**Kata Kunci :**  
In-Silico, Senyawa  
Bahan Alam, Metode  
Komputasi

---

## Abstrak

Senyawa bahan alam sebagai sediaan farmasi telah banyak diteliti. Banyak penelitian isolasi senyawa bahan alam yang telah dipublikasi. Selain isolasi senyawa bahan alam, penelitian uji coba bahan alam yang berpotensi sebagai obat suatu penyakit juga telah banyak dipublikasikan. Studi In-Silico potensi senyawa bahan alam pun kini semakin sering digunakan untuk mengetahui potensi senyawa bahan alam tersebut. Melalui metode komputasi ini, peneliti lebih mengetahui interaksi senyawa dengan enzim atau molekul target..

## Abstract

**Keywords:**  
In-Silico, Natural  
Material Compounds,  
Computational Methods

Compounds of natural ingredients as pharmaceutical preparations have been widely studied. Many studies on the isolation of natural compounds have been published. In addition to the isolation of compounds from natural ingredients, trials of natural materials that have the potential to cure a disease have also been published. In-Silico studies of the potential of natural compounds are now increasingly being used to determine the potential of these natural compounds. Through this computational method, researchers know more about the interaction of compounds with enzymes or target molecules.

.

.

## 1. Pendahuluan

Penggunaan tanaman-tanaman herbal sebagai obat-obatan mulai dikembangkan di berbagai negara baik untuk terapi maupun untuk pencegahan suatu penyakit (Pathak and Das, 2013). Tanaman-tanaman tersebut diantaranya adalah *Allium sativum* yang digunakan sebagai antiplasmodium (Fatmawaty, 2015), daun katemas digunakan sebagai antidiabetes (Hilma, 2020), *Sargassum sp.* sebagai Anti-aterosklerosis (Zaidan, 2019) dan masih banyak tanaman lainnya. Kini banyak sediaan farmasi dari senyawa bahan alam digunakan untuk terapi kanker (Mastura, 2020).

Eksplorasi obat-obatan baru untuk terapi kanker yang memiliki progresifitas cepat bisa menjadi strategi repurposing obat untuk melewati langkah praklinis yang biasanya memerlukan pekerjaan dan sumber daya yang melelahkan. Di sisi lain, pengembangan agen yang ada di masa depan bisa lebih mudah dimanfaatkan oleh masyarakat. Untuk tujuan ini, eksplorasi biodiversitas sumber daya alam Indonesia yang sering digunakan adalah pilihan terbaik (Amalina, 2020).

Dalam perkembangannya, penelitian tentang bahan alam dapat dilakukan dengan metode In-silico. In-silico adalah salah satu

metode dalam bidang sains yang menggabungkan pengetahuan sains baik fisika, kimia dan biologi dengan teknik komputasi (Bare, 2019). Kajian-kajian In-silico tersebut diantaranya kajian tentang senyawa aktif daun tanaman asam jawa yang berpotensi sebagai antiinflamasi (Yunita, 2019) dan juga *molecular docking* senyawa dari daun dadap belendung sebagai antikanker payudara MCF-7 (Mardianingrum, 2015). Selain itu, kajian In-Silico lainnya yaitu kajian interaksi senyawa aktif kayu ular sebagai inhibitor *Plasmodium falciparum* (Novian, 2019), pemetaan bioaktivitas senyawa metabolit sekunder pada kayu secang (Sari, 2022) dan aktivitas biologi senyawa kimia dalam tanaman Pepper nigrum (Sari, 2020).

### Senyawa Aktif Bahan Alam

Berbagai senyawa bahan alam yang aktif bagi tanaman banyak ditemukan dengan menggunakan proses isolasi. Senyawa tersebut diharapkan mampu dijadikan sebagai sisi aktif obat yang berikatan dengan reseptornya. Usaha pengembangan senyawa aktif tanaman telah dilakukan untuk dijadikan sebagai bahan sediaan obat (Fadila, 2018).

Beberapa manfaat senyawa aktif dari

bahan alam yang dimanfaatkan untuk pengobatan dan terapi. Diantara manfaat tersebut yaitu untuk menghentikan metastasis kanker payudara.

**Tabel 1.** Beberapa tanaman dan senyawa aktif

Tanaman	Ligan
-	Doksorubisin
Curcuma sp.	Kurkumin
Citrus sp.	Hesperidin
	Hesperetin
	Naringenin

	Nobiletin
	Tangeretin
Caesalpinia	Brazilin
sappan	Brazilein
Alpinia	ACA
Galanga	Galangin

Table 1 menunjukkan beberapa senyawa aktif yang terdapat pada tanaman. Senyawa aktif tersebut berfungsi sebagai senyawa antikanker yang dapat digunakan untuk terapi kanker payudara (Amalina, 2020).

Senyawa Aktif	Sumber Tanaman
Emodin	Ketepeng badak ( <i>Cassia alata</i> )
Luteolin	Seledri ( <i>Apium graveolens</i> )
Teaflavin-3,3'-digalat	Teh hitam ( <i>Camellia sinensis</i> )
Kurkumin	Kunyit ( <i>Curcuma sp.</i> )
Kaemferol	Jambu biji ( <i>Psidium guajava</i> )
Kuersetin	Jeruk ( <i>Citrus aurantium</i> )
Ekstrak kasar	Amis-amisan ( <i>Houttuynia cordata</i> )
Mirisetin	Cengkeh ( <i>Syzygium aromaticum</i> )
Skutelarein	Sapu manis ( <i>Scoparia dulcis</i> )
10-gingerol	Jahe ( <i>Zingiber officinalis</i> )
Oleoresin	Jahe ( <i>Zingiber officinalis</i> )
Mangostin	Manggis ( <i>Garcinia mangostana</i> )
Piseatanol	Anggur ( <i>Vitis vinifera</i> )
Alil disulfida	Bawang putih ( <i>Allium cepa</i> )
Andrograpisida	Sambiloto ( <i>Andrographis paniculata</i> )
Biorobin	Beringin ( <i>Ficus benjamina</i> )
Neohesperidin	Jeruk ( <i>Citrus aurantium</i> )
(-)-Epigallocatekin galat	Teh hitam ( <i>Camelia sinensis</i> )
14-Hidroksisi perotundon	Rumput teki ( <i>Cyperus rotundus</i> )
Teaflavin 3,3'-di-O-galat	Teh hitam ( <i>Camelia sinensis</i> )
Filaemblisin B	Buah malaka ( <i>Phyllanthus emblica</i> )

Selain sebagai antikanker beberapa senyawa aktif berfungsi sebagai

antivirus seperti pada Table 2. Tabel 2 menunjukkan senyawa aktif yang

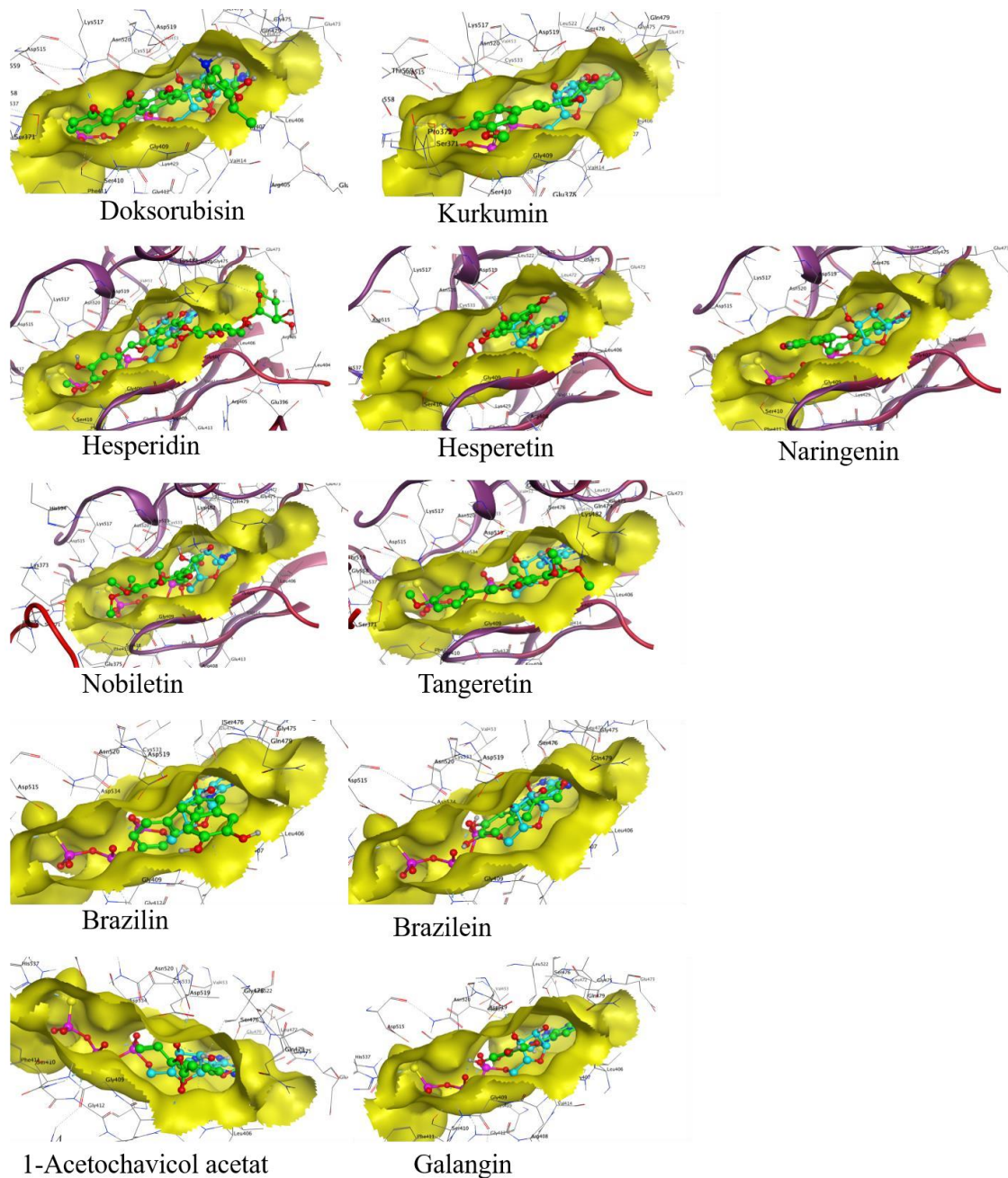
berperan sebagai antivirus. Senyawa aktif tersebut memiliki potensi untuk menghambat virus SARS-Cov 2. Senyawa aktif antivirus dari tanaman obat memiliki mekanisme penghambatan yang beragam. Jalan masuk virus merupakan target yang menarik untuk terapi karena dapat memblokir penyebaran virus pada tahap awal, sehingga meminimalkan kesempatan bagi virus untuk berevolusi dan membangun resistensi obat (Septiana, 2020).

## **2. Hasil Kajian In-Silico Senyawa Bahan Alam**

Perancangan obat adalah suatu usaha untuk mengembangkan obat yang telah ada. Rancangan obat digambarkan sebagai proses elaborasi sistematis untuk mengembangkan lebih lanjut obat yang sudah ada. Tujuannya adalah mendapatkan obat baru dengan aktivitas yang lebih baik dan mengurangi atau

menghilangkan efek samping yang ada melalui manipulasi molekul (Hardjono, 2017).

Berdasarkan beberapa penelitian sebelumnya ditemukan bahwa Metode *Molecular docking* (MD) dapat digunakan untuk memprediksi interaksi terbaik antara senyawa obat dengan protein (Singh IV, 2018). Metode ini mampu melakukan skrining Pustaka senyawa dan melakukan kalkulasi ikatan terkuat antara senyawa bioaktif dengan protein target melalui berbagai fungsi skoring. Hal ini merupakan cara untuk mengeksplorasi interaksi dua molekul seperti kandidat obat dengan suatu enzim target yang saling berikatan satu dengan yang lain. Molekul bioaktif atau ligan dapat berikatan pada suatu reseptor tertentu. Interaksi kompleks ligan-reseptor ini diidentifikasi oleh program *docking* (Fatmawaty, 2015).



(Amalina, 2020)

**Gambar 1.** Profil interaksi ikatan senyawa metabolit sekunder bahan alam Indonesia terhadap protein NF- $\kappa$ B

Studi *Molecular Docking* kini banyak dilakukan untuk pengembangan senyawa obat antikanker. *Molecular*

*docking* dilakukan terhadap protein NF- $\kappa$ B, yang diyakini berkontribusi dalam proliferasi dan metastasis kanker payudara (Kawai, 2007). Hasil tersebut memperlihatkan bahwa senyawa-senyawa dapat mengikat secara kuat ke reseptor target pada sisi aktif yang diinginkan (Gambar 1). Menariknya, pada penelitian tersebut hampir semua senyawa metabolit sekunder tanaman kecuali tangeretin memiliki afinitas pengikatan yang lebih baik terhadap reseptor NF- $\kappa$ B dibandingkan dengan kemoterapi doksorubisin. Afinitas pengikatan yang lebih tinggi ditandainya dengan nilai energi semakin negatif menandakan aktivitas penghambatan jalur pensinyalan yang signifikan (Utomo, 2020).

**Tabel 3.** Penambatan In-Siliko Molekul Senyawa Alkaloid dan Molekul Senyawa Pembanding Lopinavir dan Remdesivir pada Enzim Protease 6LU7 (Marpaung, 2020)

Senyawa	Docking Score
Oblongine	-78.478
Actinodaphnine	-82.0336
Isoboldine	-83.0541
Cassameridine	-84.3528
Coclaurine	-88.684
Corydine	-83.5198
Corytuberine	-81.6024
Dicentrine	-83.0753

Isocorydine	-82.109
Isodomeesticine	-69.7002
Juziphine	-84.3508
Laurotetanine	-87.7018
Lindcarpine	-76.0105
N-Methylcoclaurine	-89.7024
N-ethylaurotetanine	-84.0258
N-Methylindcarpine	-74.1587
Norcorydine	-82.2416
Norisoboldine	-80.7246
Norisocorydine	-79.5392
Xanthoplanine	-87.0022
Lopinavir	-121.579
Remdisivir	-123.185

Selain antikanker, sejak tahun 2020 penelitian komputasi juga mengarah pada pengembangan obat untuk mengatasi virus SARS-Cov 2. Tabel 3 memperlihatkan hasil penambatan 20 molekul senyawa alkaloid dan molekul senyawa pembanding lopinavir dan remdesivir pada enzim protease 6LU7. Enzim Protease 6LU7 yaitu salah satu enzim yang terdapat pada virus SARS-Cov 2.

## Kesimpulan

Studi Biokomputasi bisa dimanfaatkan sebagai dasar dalam pengembangan obat. Senyawa-senyawa aktif dari bahan alam dapat diuji dengan penambatan molekul dengan protein target. Contoh studi biokomputasi yang mulai dikembangkan yaitu *molecular docking*



senyawa bahan alam sebagai antikanker dan antivirus SARS-Cov 2.

## Referensi

- Amalina, dkk., 2020, Mengungkap Potensi Metabolit Sekunder Tanaman Herbal Indonesia untuk Menghentikan Metastasis Kanker Payudara: Pendekatan in-silico, *Indonesian Journal of Chemical Science*, 9(3), 154-159.
- Bare, Y., S, M., Tiring, S.S.N.D., Sari, D.R.T., Maulidi, A., 2020, Virtual Screening: Prediksi potensi 8-shogaol terhadap c-Jun N-Terminal Kinase (JNK), *J. Penelitian dan Pengkajian Ilmu Pendidik: E-Saintika*, 4, 1–6.
- Fadila, dkk., 2018, *Kajian In-Silico Senyawa Turunan Klorokalkon sebagai Antikanker*, Mulawarman Pharmaceuticals Conferences, Proceeding, 24-50.
- Fatmawaty, dkk., 2015, In Silico Screening of Potential Allicin Compound from *Allium Sativum* as Antiplasmodium, *JKTI*, 17(2), 175-184.
- Hardjono, S.J.J.I.K.I., Prediksi Sifat Farmakokinetik, Toksisitas dan Aktivitas Sitotoksik Turunan NBenzoil-N'-(4-fluorofenil) tiourea sebagai Calon Obat Antikanker melalui Pemodelan Molekul, 14(2), 246-255.
- Hilma, Rahmiwati., Gustina, Netti., Syahri, Jufrizal., 2020, Pengukuran Total Fenolik, Flavonoid, Aktivitas Antioksidan dan Antidiabetes Ekstrak Etil Asetat Daun Katemas (*Euphorbia heterophylla*, L.) secara In Vitro dan In Silico Melalui Inhibisi Enzim  $\alpha$ -Glukosidase, *ALCHEMY Jurnal Penelitian Kimia*, 16(2), 240-249.
- Kawai, T., & Akira, S., 2007, Signaling to NF- $\kappa$ B by Toll-like Receptors, *Trends in Molecular Medicine*, 13(11), 460–469.
- Mardianingrum, dkk., 2015, Isolasi dan Molecular Docking Senyawa 6,7-Dihidro-17-hidroksierisotrin dari Daun Dadap Belendung (*Erythrina poeppigiana*) terhadap Aktivitas Sitotoksik Antikanker Payudara MCF-7, *Chimica et Natura Acta*, 3(3), 90-93.

- Marpaung, J.K., Tambunan, M.R., 2020, Activity of Involving Protease Enzyme 6LU7 SARS-Cov-2 Virus by Alkaloid Compounds from Attarasa (*Litsea cubeba* (Lour.) Pers.) In-Silico, *Farmanesia*, 7(2), 65-72.
- Mastura, dkk., 2020, Biocomputation of D-alpha-Tocopherol Activities from Zodia (*Evodia suaveolens*) Leaf Extract as an Anticancer In-Silico, *LenteraBio*, 9(2), 129-136.
- Novian, dkk., 2019, Uji Farmakodinamik, Drug-Likeness, Farmakokinetik dan Interaksi Senyawa Aktif Kayu Ular (*Strychnos lucida*) sebagai Inhibitor Plasmodium Falciparum secara In-Silico, *Jurnal Veteriner Nusantara*, 2(1), 70-78.
- Pathak, K., Das, R.J., 2013, Herbal Medicine- A Rational Approach in Health Care System, *Int. J. Herb. Med.*, 1, 86–89.
- Sari, D.R.T., Bare, Y., 2020, Physicochemical properties and biological activity of bioactive compound in Pepper nigrum: In silico study, *Spizaetus: Jurnal Biologi dan Pendidikan Biologi*, 1(1), 1-6.
- Sari, dkk., 2022, Pemetaan Bioaktivitas Senyawa Metabolit Sekunder Pada Kayu Secang (*Caesalpinia sappan*) Secara In-Silico, *Journal Pharmasci (Journal of Pharmacy and Science)*, 7(1), 21-28.
- Septiana, Eris., 2020, Prospek Senyawa Bahan Alam Sebagai Antivirus dalam Menghambat SARS-CoV-2, *Bio-Tren*, 11(1), 30-38.
- Utomo, R.Y., Ikawati, M., & Meiyanto, E., 2020, Revealing the Potency of Citrus and Galangal Constituents to Halt SARS-CoV-2 Infection, *Preprints.Org*, 2(March): 1–8.
- Yunita, dkk., 2019, Anti-Inflammatory Potential of Tamarind (*Tamarindus Indica L.*) Leaves: Study In-Silico, *Akfarindo*, 4(2), 42-50
- Zaidan, dkk., 2019, Activity of Compounds in *Sargassum sp.* as Anti-atherosclerosis with Ligand-Receptor Comparison HMG-CoA Reductase Simvastatin (1HW9) and In-Silico Toxicity Tes, *Jurnal Ilmu Kefarmasian Indonesia*, 17(1), 120-125.