Journal of Innovative and Creativity
Journal Homepage: https://joecy.org/index.php/joecy
e-mail: journaljoecy@gmail.com

Faculty of Education
University of Pahlawan Tuanku Tambusai
ISSN 2775-771X (Online)
ISSN 2962-570X (Printed)
6 (2) 2026, Page: 28989-28997

Pendekatan Multidisipliner dalam Kimia Medisinal: Dari Mekanisme Hingga Desain Obat

Saeful Amin[1], Rexsy Adya Guntara[2], Muhammad Zamzam Imanulhaq[3], Sopi Syipaul Mardiana[4]

[1,2,3,4]Universitas Bakti Tunas Husada

*Corresponding Author: Saeful Amin, saefulamin@universitas-bth.ac.id

Published: Juni , 2026

ABSTRACT

Kimia medisinal merupakan bidang ilmu yang berkembang pesat dengan mengintegrasikan berbagai disiplin ilmu seperti kimia, biologi, farmasi, dan ilmu komputer dalam proses penemuan dan pengembangan obat. Kajian ini didasari oleh meningkatnya kompleksitas sistem biologis serta kebutuhan mendesak akan strategi penemuan obat yang lebih efisien, akurat, dan berbasis data ilmiah. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji peran pendekatan multidisipliner dalam memahami mekanisme kerja obat serta dalam proses desain obat modern melalui studi literatur ilmiah. Metode yang digunakan adalah literature review dengan pendekatan deskriptif-kualitatif terhadap 15 jurnal ilmiah. Hasil kajian menunjukkan bahwa pemahaman mekanisme kerja obat sangat bergantung pada interaksi molekuler antara ligan dan target biologis, seperti enzim dan reseptor. Pendekatan multidisipliner yang menggabungkan metode eksperimental dan komputasi, seperti molecular docking, quantitative structure–activity relationship (QSAR), serta artificial intelligence (AI), terbukti mampu meningkatkan efisiensi dan akurasi dalam proses penemuan obat. Selain itu, integrasi ilmu kimia dan biologi molekuler memungkinkan identifikasi target yang lebih spesifik, sehingga menghasilkan senyawa obat yang lebih selektif dan aman. Dengan demikian, pendekatan multidisipliner menjadi strategi utama dalam pengembangan obat modern yang efektif, efisien, dan berbasis data.

Keywords: Kimia medisinal, Mekanisme obat, Desain obat, Multidisipliner, Molecular docking

© The Author(s). 2021 Open Access This article is licensed under a Creative Commons Atibution 4.0 International License, which permits use, sharing, adaptation, distribution and reproduction in any medium or format, as long as you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons licence, and indicate if changes were made. The images or other third party material in this article are included in the article's Creative Commons licence, unless indicated otherwise in a credit line to the material. To view a copy of this licence, visit http://creativecommons.org/licenses/by/4.0

PENDAHULUAN

Perkembangan kimia medisinal pada era modern tidak dapat dipisahkan dari kemajuan ilmu pengetahuan dan teknologi yang mendorong integrasi berbagai disiplin ilmu. Kompleksitas sistem biologis menuntut pendekatan yang tidak hanya berfokus pada sintesis senyawa, tetapi juga pada pemahaman mendalam mengenai interaksi molekuler dalam tubuh. Oleh karena itu, pendekatan multidisipliner menjadi sangat relevan dalam menjelaskan hubungan antara struktur kimia, aktivitas biologis, serta mekanisme kerja obat secara komprehensif (Hughes et al., 2011).

Dalam konteks mekanisme kerja obat, interaksi antara ligan dan target biologis merupakan faktor penentu utama dalam menghasilkan efek terapeutik. Interaksi ini melibatkan berbagai gaya non- kovalen seperti ikatan hidrogen, interaksi elektrostatik, dan gaya van der Waals, yang secara kolektif menentukan

afinitas dan selektivitas suatu senyawa terhadap targetnya. Pemahaman terhadap interaksi ini menjadi dasar dalam pengembangan obat yang lebih efektif dan minim efek samping (Moussaoui et al., 2024).

Selain itu, perkembangan pendekatan berbasis struktur *(structure-based drug design)* telah memberikan kontribusi signifikan dalam penemuan obat modern. Dengan memanfaatkan informasi struktur tiga dimensi dari target biologis, peneliti dapat merancang senyawa yang memiliki kecocokan optimal dengan situs aktif reseptor. Pendekatan ini terbukti lebih efisien dibandingkan metode konvensional karena mampu mengarahkan proses desain obat secara rasional dan sistematis (Song et al., 2023).

Seiring berkembangnya pendekatan berbasis struktur, metode kuantitatif seperti *quantitative structure–activity relationship* (QSAR) turut memberikan kontribusi besar dalam menghubungkan parameter fisikokimia suatu senyawa seperti lipofilisitas (log P), polarisabilitas, dan muatan parsial dengan aktivitas biologisnya. Model matematika yang dihasilkan dari QSAR memungkinkan prediksi aktivitas senyawa baru tanpa harus melalui seluruh rangkaian uji laboratorium, sehingga menghemat waktu dan biaya secara substansial (Cherkasov et al., 2014). Dalam konteks modern, model QSAR berbasis machine learning bahkan mampu mengolah dataset besar dengan variabel yang jauh lebih kompleks.

Lebih lanjut, perkembangan teknologi komputasi telah mendorong penggunaan metode in silico dalam analisis kimia medisinal. Molecular docking, misalnya, digunakan untuk memprediksi interaksi antara ligan dan reseptor serta menghitung kekuatan ikatan yang terbentuk. Metode ini sangat membantu dalam tahap awal drug discovery karena mampu melakukan virtual screening terhadap ribuan senyawa dalam waktu yang relatif singkat (Tajiani et al., 2023). Pelengkap dari molecular docking adalah simulasi dinamika molekuler (molecular dynamics simulation), yang memungkinkan evaluasi stabilitas kompleks ligan-reseptor dalam kondisi solven yang lebih realistis dan dinamis (Hollingsworth & Dror, 2018).

Dalam beberapa tahun terakhir, kemajuan kecerdasan buatan (artificial intelligence) dan machine learning telah membawa perubahan paradigma yang fundamental dalam kimia medisinal. Platform seperti deep learning dan generative adversarial networks (GANs) kini mampu menghasilkan struktur molekul baru secara otomatis *(de novo drug design)* berdasarkan pola yang dipelajari dari database senyawa yang ada. Kapasitas ini melampaui kemampuan metode komputasi konvensional dalam hal kecepatan, akurasi, dan cakupan ruang kimia yang dapat dieksplorasi (Vamathevan et al., 2019; Stokes et al., 2020).

Penelitian-penelitian yang dilakukan oleh Amin dan kolega juga menunjukkan bahwa integrasi pendekatan komputasi dalam kimia medisinal mampu meningkatkan efisiensi dalam optimasi senyawa bioaktif dari bahan alam, termasuk dalam konteks resistensi obat dan pengembangan obat antikanker berbasis flavonoid (Amin & Mustafidah, 2024; Amin & Wulandari, 2025; Amin et al., 2025). Kontribusi ini memperkuat argumen bahwa pendekatan multidisipliner tidak hanya relevan dalam konteks global, tetapi juga memiliki signifikansi besar dalam konteks riset nasional.

Berdasarkan uraian tersebut, kajian literatur ini dilakukan untuk mengeksplorasi secara sistematis dan komprehensif peran pendekatan multidisipliner dalam kimia medisinal, khususnya dalam memahami mekanisme kerja obat di tingkat molekuler dan dalam proses desain obat modern. Diharapkan kajian ini dapat memberikan kontribusi ilmiah yang bermakna bagi pengembangan strategi penemuan obat yang lebih efisien, efektif, dan berbasis data di masa mendatang.

METODE

Desain Penelitian

Penelitian ini menggunakan metode literature review dengan pendekatan deskriptif-kualitatif yang bertujuan untuk mengkaji secara komprehensif peran pendekatan multidisipliner dalam kimia medisinal, khususnya dalam memahami mekanisme kerja obat dan proses desain obat modern. Metode ini dipilih karena mampu mengintegrasikan berbagai temuan ilmiah dari penelitian sebelumnya tanpa melibatkan

eksperimen langsung, sehingga memberikan gambaran yang luas dan mendalam mengenai perkembangan konsep dalam bidang kimia medisinal.

Sumber dan Strategi Pencarian Literature

Sumber data dalam penelitian ini diperoleh dari 15 jurnal ilmiah yang terdiri dari 10 jurnal internasional bereputasi dan 5 jurnal karya Saeful Amin yang relevan dengan topik penelitian. Pemilihan jurnal dilakukan secara selektif berdasarkan kriteria inklusi, yaitu artikel harus berasal dari jurnal ilmiah, memiliki keterkaitan dengan kimia medisinal, membahas mekanisme kerja obat, desain obat, atau pendekatan komputasi seperti molecular docking dan QSAR, serta memiliki tahun publikasi dalam rentang 2015 hingga 2025 guna memastikan kebaruan dan relevansi data.

Pengumpulan data dilakukan melalui studi kepustakaan dengan menelusuri berbagai database ilmiah seperti Google Scholar, PubMed, dan ScienceDirect menggunakan kata kunci antara lain *"Medicinal chemistry", "Drug mechanism", "Drug design", "Molecular docking",* dan *"Multidisciplinary approach"*. Seluruh artikel yang diperoleh kemudian diseleksi berdasarkan relevansi topik dan kualitas publikasi, sementara sumber yang tidak memenuhi kriteria ilmiah dieliminasi dari proses analisis.

Analisis Data

Analisis data dalam penelitian ini dilakukan menggunakan pendekatan deskriptif-kualitatif dengan cara menelaah, membandingkan, dan mensintesis informasi yang diperoleh dari 15 jurnal ilmiah yang telah dipilih. Pendekatan ini digunakan untuk memberikan gambaran yang komprehensif mengenai peran pendekatan multidisipliner dalam kimia medisinal, khususnya dalam memahami mekanisme kerja obat dan proses desain obat modern. Proses analisis diawali dengan membaca secara mendalam setiap artikel untuk mengidentifikasi komponen utama, seperti tujuan penelitian, metode yang digunakan, hasil yang diperoleh, serta kesimpulan dari masing-masing studi.

Selanjutnya, data yang telah dikumpulkan diklasifikasikan ke dalam beberapa tema utama, yaitu mekanisme kerja obat, interaksi *ligan–reseptor*, pendekatan desain obat berbasis struktur, metode komputasi seperti molecular docking dan quantitative structure activity relationship (QSAR), serta integrasi teknologi seperti *artificial intelligence* dalam *drug discovery*. Pengelompokan ini bertujuan untuk mempermudah proses analisis sekaligus memberikan kerangka yang sistematis dalam memahami kontribusi masing-masing pendekatan dalam kimia medisinal.

Tahap berikutnya adalah melakukan sintesis data dengan cara menghubungkan hasil-hasil penelitian yang memiliki keterkaitan, sehingga diperoleh pola umum, tren perkembangan, serta hubungan yang signifikan antar variabel yang dikaji. Selain itu, dilakukan pula evaluasi kritis terhadap kelebihan dan keterbatasan masing-masing metode yang digunakan dalam penelitian-penelitian tersebut, seperti keterbatasan molecular docking yang bersifat statis dan ketergantungan model QSAR terhadap kualitas data.

Melalui proses analisis ini, penelitian tidak hanya menyajikan ringkasan dari berbagai studi, tetapi juga memberikan interpretasi yang lebih mendalam mengenai pentingnya pendekatan multidisipliner dalam kimia medisinal. Dengan demikian, hasil analisis diharapkan mampu memberikan kontribusi ilmiah dalam memahami arah perkembangan penemuan obat modern yang semakin terintegrasi dengan teknologi komputasi dan berbasis data.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Mekanisme Kerja Obat dalam Perspektif Kimia Medisinal

Mekanisme kerja obat merupakan fondasi utama dalam kimia medisinal yang menjelaskan proses induksi efek biologis melalui interaksi spesifik dengan target molekuler. Secara mendasar, obat bekerja bukan sebagai agen aktif yang menciptakan fungsi baru, melainkan sebagai modulator yang memodifikasi

proses biokimia yang sudah ada dalam tubuh baik dengan cara mengaktifkan (agonis), menghambat (antagonis), atau meregulasi (modulator alosterik) fungsi target biologis tertentu (Kenakin, 2019). Target biologis utama yang relevan dalam kimia medisinal meliputi enzim, reseptor transmembran, kanal ion, dan asam nukleat.

Peran Ilmu Kimia dan Biologi dalam Identifikasi Target

Identifikasi dan validasi target biologis merupakan tahap paling kritis dan paling menentukan dalam seluruh pipeline pengembangan obat. Kegagalan target yang tidak tervalidasi dengan baik menjadi penyebab utama kegagalan uji klinis fase lanjut yang membutuhkan biaya sangat besar (Hay et al., 2014). Pendekatan biologi molekuler modern, termasuk genomik, proteomik, dan transkriptomik fungsional, memungkinkan identifikasi target potensial secara sistematis melalui analisis ekspresi gen dan protein yang berubah secara patologis pada kondisi penyakit tertentu.

Teknologi penentuan struktur protein dengan resolusi tinggi seperti kristalografi sinar-X, kryo-elektron mikroskopi (cryo-EM), dan spektroskopi NMR telah merevolusi kapasitas peneliti untuk memvisualisasikan situs aktif target secara tiga dimensi. Data struktural ini tidak hanya memberikan informasi mengenai geometri situs pengikatan, tetapi juga mengungkap sifat fisikokimia mikro-lingkungan lokal termasuk distribusi muatan, aksesibilitas solven, dan fleksibilitas konformasional yang menjadi pertimbangan desain kritis dalam SBDD (Song et al., 2023). Perkembangan cryo-EM khususnya telah memungkinkan penentuan struktur protein-protein besar dan kompleks membran yang sebelumnya sulit dikristalisasi.

Validasi target mencakup demonstrasi kausalitas antara aktivitas target dan fenotipe penyakit melalui berbagai teknik eksperimental, termasuk *knockdown gen* (siRNA/CRISPR-Cas9), overekspresi gen, penggunaan antibodi neutralisasi, atau model transgenik hewan. Integrasi data dari berbagai pendekatan ini seperti bioinformatika, biologi seluler, dan kimia menghasilkan profil target yang komprehensif dan menjadi dasar yang solid untuk fase desain senyawa berikutnya (Schenone et al., 2013).

Implementasi Metode Komputasi dalam Desain Obat

Metode komputasi atau in silico telah mengubah secara fundamental cara kerja dalam kimia medisinal, terutama dalam hal kecepatan dan efisiensi eksplorasi ruang kimia. *Molecular docking* merupakan metode komputasi yang paling banyak digunakan dalam tahap awal *drug discovery*. Prinsip kerjanya adalah memprediksi orientasi geometrik ligan di dalam situs pengikatan protein target menggunakan algoritma pencarian konformasional (seperti algoritma genetik atau Monte Carlo) yang dikombinasikan dengan fungsi penilaian energi *(scoring function)* untuk memperkirakan kekuatan interaksi. Software populer seperti AutoDock Vina, Glide (Schrödinger), dan GOLD telah digunakan secara luas dalam virtual screening skala besar (Tajiani et al., 2023).

Namun, molecular docking memiliki keterbatasan inheren berupa sifat statisnya, metode ini mengasumsikan protein sebagai entitas kaku (rigid) atau semi-fleksibel, padahal protein secara biologis bersifat dinamis dan dapat mengalami perubahan konformasi signifikan selama proses pengikatan ligan *(induced fit)*. Keterbatasan ini diatasi oleh metode simulasi dinamika molekuler *(molecular dynamics simulation*/MD), yang menggunakan mekanika klasik Newton untuk mensimulasikan pergerakan atom-atom dalam sistem molekuler pada skala waktu femtodetik hingga mikrodetik. MD memberikan gambaran yang jauh lebih realistis mengenai stabilitas kompleks ligan-reseptor dalam lingkungan solven biologis, fleksibilitas konformasional protein, dan jalur masuk-keluar ligan dari situs pengikatan (Hollingsworth & Dror, 2018).

Quantitative structure activity relationship (QSAR) merupakan pendekatan matematis yang menghubungkan deskriptor fisikokimia atau struktural suatu senyawa dengan aktivitas biologisnya melalui

model regresi atau klasifikasi. Deskriptor yang digunakan mencakup sifat topologi molekuler, parameter elektronik, sifat termodinamik, dan berbagai parameter komputasi lainnya. Model QSAR yang baik memiliki nilai koefisien determinasi (R^2) tinggi pada set pelatihan sekaligus mempertahankan kemampuan prediksi yang baik pada set validasi (Cherkasov et al., 2014). Penggunaan QSAR 3D, seperti *Comparative Molecular Field Analysis* (CoMFA) dan C*omparative Molecular Similarity Indices Analysis* (CoMSIA), memungkinkan analisis yang lebih detail mengenai kontribusi spasial berbagai gugus fungsi terhadap aktivitas biologis.

Pendekatan QSAR memungkinkan peneliti memprediksi aktivitas biologis suatu senyawa berdasarkan hubungan struktur kimia dan aktivitas farmakologinya. Metode ini membantu mempercepat proses penemuan obat karena mampu mengurangi jumlah uji eksperimental yang diperlukan. Model matematika yang dihasilkan dari QSAR memungkinkan prediksi aktivitas senyawa baru tanpa harus melalui seluruh rangkaian uji laboratorium, sehingga menghemat waktu dan biaya penelitian (Cherkasov et al., 2014; Tropsha et al., 2024).

Integrasi Kecerdasan Buatan dan Sinergi Multidisipliner

Penerapan kecerdasan buatan (*artificial intelligence*/AI) dan *machine learning* dalam kimia medisinal merepresentasikan paradigma perubahan yang paling transformatif dalam dua dekade terakhir. Kemampuan algoritma deep learning untuk mengekstrak pola kompleks dari data multidimensi dalam jumlah besar termasuk data struktural, genomik, proteomik, dan data uji biologis telah membuka dimensi baru dalam kemampuan prediksi dan desain molekul. Vamathevan et al. (2019) mendokumentasikan bahwa penerapan AI dalam berbagai tahapan drug discovery, dari identifikasi target hingga prediksi toksisitas dan optimasi formulasi, dapat memangkas waktu pengembangan obat secara substansial.

Salah satu aplikasi AI yang paling revolusioner adalah *de novo drug design* berbasis *generative model*, termasuk *variational autoencoders* (VAEs), *generative adversarial networks* (GANs), dan model berbasis transformer seperti yang dikembangkan dari arsitektur GPT. Platform ini mampu menghasilkan struktur molekul baru yang memenuhi kriteria fisikokimia dan aktivitas biologis yang telah ditentukan, sekaligus mengoptimalkan berbagai properti ADMET *(absorption, distribution, metabolism, excretion, toxicity)* secara simultan (Stokes et al., 2020). Penelitian inovatif oleh Stokes et al. (2020) berhasil mengidentifikasi senyawa halicin antibiotik baru dengan mekanisme kerja novel sepenuhnya melalui pendekatan deep learning, yang menegaskan potensi revolusioner AI dalam drug discovery.

Integrasi multidisipliner yang sesungguhnya terwujud ketika berbagai pendekatan eksperimental dan komputasi bekerja dalam siklus yang saling memperkuat. Data eksperimen dari uji biologis dan struktural memperkaya model komputasi, sementara prediksi komputasi mengarahkan eksperimen berikutnya secara lebih efisien (*iterative cycle of design-make-test-analyze*/DMTA). Sinergi ini memerlukan kolaborasi erat antara kimiawan medisinal, biolog struktural, bioinformatikus, dan ilmuwan data sebuah model riset yang semakin menjadi standar dalam industri farmasi global maupun riset akademik (Schenone et al., 2013; Amin et al., 2025).

Kajian oleh Amin dan kolega (Amin & Mustafidah, 2024; Amin & Wulandari, 2025; Amin et al., 2025) secara konsisten menunjukkan efektivitas pendekatan multidisipliner dalam konteks optimasi senyawa bioaktif dari bahan alam Indonesia. Studi-studi ini mengkombinasikan analisis in silico (molecular docking, QSAR) dengan kajian literatur farmakologi yang mendalam untuk mengidentifikasi senyawa kandidat dari bahan alam yang berpotensi sebagai antikanker, antikolesterol, dan antibiotik baru. Pendekatan ini relevan dan strategis dalam konteks keanekaragaman hayati Indonesia yang kaya sebagai sumber senyawa bioaktif potensial.

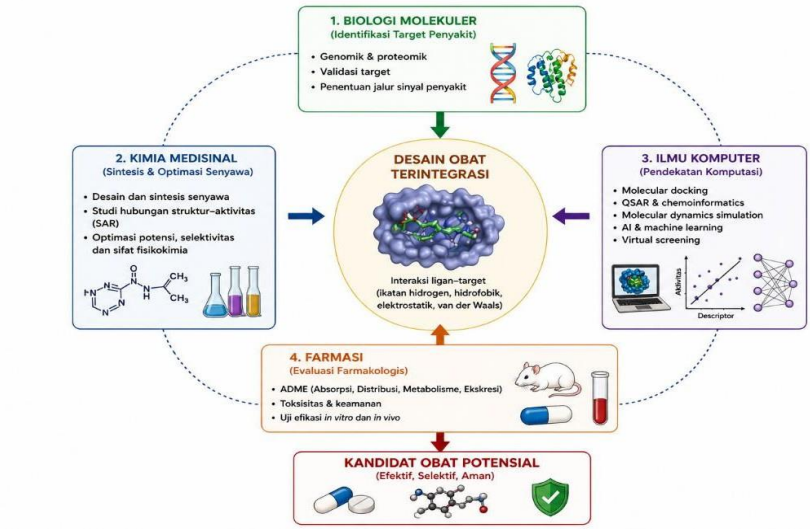
Molecular docking digunakan untuk memprediksi interaksi antara ligan dan reseptor sehingga dapat diketahui afinitas serta stabilitas ikatan yang terbentuk. Teknik ini menjadi bagian penting dalam

computer-aided drug design karena mampu membantu seleksi kandidat senyawa secara lebih cepat dan efisien. Selain molecular docking, perkembangan artificial intelligence drug design (AIDD) juga mempercepat proses identifikasi kandidat obat melalui pendekatan berbasis data dan machine learning dibanding metode konvensional (Wang et al., 2024).

Tabel 1. Perbandingan Metode Komputasi dalam Drug Discovery

Metode Komputasi	**Fungsi Utama**	**Keunggulan**	**Keterbatasan**
Molecular Docking	Memprediksi interaksi ligan dengan reseptor	Cepat, efisien, visualisasi ikatan molekul	Bersifat statis, kurang Menggambarkan kondisi biologis nyata
QSAR	Memprediksi aktivitas biologis berdasarkan parameter fisikokimia	Menghemat sintesis dan uji laboratorium	Bergantung pada kualitas dataset
Molecular Dynamics Simulation	Menganalisis stabilitas interaksi molekul dalam kondisi dinamis	Lebih realistis dan akurat	Membutuhkan komputasi tinggi
Artificial Intelligence (AI)	Menyaring dan memprediksi kandidat obat dalam jumlah besar	Sangat cepat, mampu analisis big data	Model bisa bias jika data kurang baik

Berdasarkan Tabel 1, dapat diketahui bahwa masing-masing metode komputasi memiliki fungsi dan kontribusi yang berbeda dalam proses drug discovery. Molecular docking lebih berfokus pada prediksi awal interaksi antara ligan dan reseptor, sedangkan QSAR digunakan untuk memprediksi aktivitas biologis berdasarkan karakteristik fisikokimia senyawa. Di sisi lain, molecular dynamics simulation memberikan analisis yang lebih realistis terhadap stabilitas kompleks molekul dalam sistem biologis, sementara artificial intelligence berperan dalam mempercepat penyaringan senyawa dan pengolahan data skala besar. Dengan demikian, penggunaan metode-metode tersebut secara terintegrasi mampu meningkatkan efisiensi, akurasi, dan peluang keberhasilan dalam desain obat modern.



Gambar 1. Skema Pendekatan Multidisipliner dalam Pengembangan Obat

Gambar 1 menunjukkan bahwa pengembangan obat modern tidak dapat dilakukan hanya dengan satu disiplin ilmu, melainkan membutuhkan integrasi beberapa bidang utama. Biologi molekuler berfungsi dalam identifikasi target penyakit, kimia medisinal berperan dalam sintesis dan optimasi struktur senyawa, ilmu komputer mendukung melalui analisis komputasi seperti *molecular docking*, QSAR, dan *artificial intelligence*, sedangkan farmasi mengevaluasi aspek farmakokinetik, toksisitas, dan efikasi. Sinergi dari keempat bidang tersebut menghasilkan kandidat obat yang lebih potensial, selektif, dan aman.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil kajian literatur yang telah dilakukan, dapat disimpulkan bahwa pendekatan multidisipliner memiliki peran yang sangat penting dalam perkembangan kimia medisinal modern, khususnya dalam memahami mekanisme kerja obat serta mempercepat proses desain dan penemuan obat baru. Integrasi ilmu kimia, biologi molekuler, farmasi, dan teknologi komputasi memungkinkan analisis yang lebih komprehensif terhadap hubungan antara struktur molekul, target biologis, dan aktivitas farmakologis suatu senyawa.

Pemahaman mengenai mekanisme kerja obat menunjukkan bahwa keberhasilan suatu terapi sangat ditentukan oleh interaksi spesifik antara ligan dan reseptor, yang dipengaruhi oleh afinitas, selektivitas, serta stabilitas ikatan molekuler. Dalam hal ini, ilmu kimia medisinal memberikan kontribusi pada optimasi struktur senyawa, sedangkan ilmu biologi membantu dalam identifikasi target yang relevan terhadap penyakit.

Selain itu, pendekatan komputasi seperti molecular docking, quantitative structure–activity relationship (QSAR), dan simulasi dinamika molekuler terbukti mampu meningkatkan efisiensi seleksi kandidat obat melalui prediksi aktivitas biologis secara lebih cepat dan akurat. Perkembangan artificial intelligence juga semakin memperkuat proses drug discovery dengan kemampuan analisis big data, virtual screening, dan desain molekul secara otomatis.

Dengan demikian, sinergi antar berbagai disiplin ilmu tidak hanya mempercepat proses pengembangan obat, tetapi juga meningkatkan peluang dihasilkannya senyawa terapeutik yang lebih efektif, selektif, aman, dan berbasis data. Pendekatan multidisipliner dapat dinyatakan sebagai strategi utama dalam menjawab tantangan penemuan obat modern di era teknologi.

REFERENCES

Amin, S., & Mustafidah, S. (2024). Review artikel: Pendekatan *in silico* dalam kimia medisinal tentang resistensi antibiotik. *Jurnal Ilmu Medis Indonesia, 4*(1), 83–91. https://doi.org/10.35912/jimi.v4i1.45651

Amin, S., & Wulandari, R. (2025). Tinjauan kimia medisinal dalam pengembangan obat berbasis flavonoid: Studi literatur. *Jurnal Ilmiah Kedokteran dan Kesehatan, 5*(1), 110–118. https://doi.org/10.55606/klinik.v5i1.5538

Amin, S., Aini, A. N., Putri Utami, N. M., & Aryani, D. (2025). Kimia medisinal dalam terapi kanker: Analisis jalur sinyal dan interaksi ligand-target. *Jurnal Riset Rumpun Ilmu Kesehatan, 4*(1), 52–62. https://doi.org/10.55606/jurrikes.v4i1.4385

Cherkasov, A., Muratov, E. N., Fourches, D., Varnek, A., Baskin, I. I., Cronin, M. T. D., Dearden, J., Gramatica, P., Martin, Y. C., Todeschini, R., Consonni, V., Kuz'min, V. E., Cramer, R. D., & Tropsha, A. (2014). QSAR modeling: Where have you been? Where are you going to? *Journal of Medicinal Chemistry, 57*(12), 4977–5010. https://doi.org/10.1021/jm4004285

Hay, M., Thomas, D. W., Craighead, J. L., Economides, C., & Rosenthal, J. (2014). Clinical development success rates for investigational drugs. Nature Biotechnology, 32(1), 40–51. https://doi.org/10.1038/nbt.2786

Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. (2018). Molecular dynamics simulation for all. Neuron, 99(6), 1129–1143. https://doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011

Hughes, J. P., Rees, S., Kalindjian, S. B., & Philpott, K. L. (2011). Principles of early drug discovery. British Journal of Pharmacology, 162(6), 1239–1249. https://doi.org/10.1111/j.1476-5381.2010.01127.x

Kenakin, T. (2019). A pharmacology primer: Techniques for more effective and strategic drug discovery (5th ed.). Academic Press. https://doi.org/10.1016/C2018-0-04389-0

Moussaoui, M., et al. (2024). Structure-based drug design and molecular interaction analysis. *Scientific Reports, 14*, 66877. https://doi.org/10.1038/s41598-024-66877-2

Schenone, M., Dančík, V., Wagner, B. K., & Clemons, P. A. (2013). Target identification and mechanism of action in chemical biology and drug discovery. Nature Chemical Biology, 9(4), 232–240. https://doi.org/10.1038/nchembio.1199

Song, F., Li, X., Wang, Q., Liao, L., & Zhang, J. (2023). Molecular docking and structure-based drug design strategies. *Frontiers in Pharmacology, 14*, 1185004. https://doi.org/10.3389/fphar.2023.1185004

Stokes, J. M., Yang, K., Swanson, K., Jin, W., Cubillos-Ruiz, A., Donghia, N. M., ... & Collins, J. J. (2020). A deep learning approach to antibiotic discovery. Cell, 180(4), 688–702. https://doi.org/10.1016/j.cell.2020.01.021

Tajiani, F., et al. (2023). Molecular docking analysis of bioactive compounds. *BMC Chemistry, 17*(1), 99. https://doi.org/10.1186/s13065-023-00999-y

Tropsha, A., Isayev, O., Varnek, A., Schneider, G., & Cherkasov, A. (2024). Integrating QSAR modelling and deep learning in drug discovery: The emergence of deep QSAR. *Nature Reviews Drug Discovery, 23*(2), 141–155. https://doi.org/10.1038/s41573-023-00832-0

Vamathevan, J., Clark, D., Czodrowski, P., Dunham, I., Ferran, E., Lee, G., Li, B., Madabhushi, A., Shah, P., Spitzer, M., & Zhao, S. (2019). Applications of machine learning in drug discovery and development. *Nature Reviews Drug Discovery, 18*(6), 463–477. https://doi.org/10.1038/s41573-019-0024-5

Wang, K., Huang, Y., Wang, Y., You, Q., & Wang, L. (2024). Recent advances from computer-aided drug design to artificial intelligence drug design. *RSC Medicinal Chemistry, 15*(17), 3978–4000. https://doi.org/10.1039/D4MD00522H

Zhang, L., Chen, H., Zheng, H., Hu, Y., & Liu, H. (2024). Advances in computational drug design and artificial intelligence applications. Drug Discovery Today, 29(3), 103521. https://doi.org/10.1016/j.drudis.2024.103521