



Masa Depan Penemuan Obat Melalui Pendekatan In Silico, Senyawa Alami, dan Strategi PROTAC

Saeful Amin

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Risma Azahra

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Alamat:

Jl. Mashudi No. 20 Kel. Kahuripan Tawang, Kota Tasikmalaya, Jawa Barat 46115

Korespondensi penulis: rismazhraz@gmail.com.

Abstract. Medicinal chemistry is a rapidly evolving multidisciplinary field that integrates chemical, biological, and information technology approaches for the discovery and development of new drugs. This article reviews 20 recent publications covering in silico methodologies, natural product development, PROTAC strategies, therapeutic peptides, prodrugs, and the exploration of the macrocyclic chemical space. Literature was sourced from international and national databases, including PubMed, Scopus, and Neliti, focusing on articles published between 2020 and 2025. The analysis reveals a shift toward the application of artificial intelligence (AI), the integration of structure-based design with physicochemical property optimization, and an increasing utilization of novel scaffolds. This review is expected to serve as a reference for researchers in identifying research opportunities and optimization strategies in modern medicinal chemistry

Keywords: Ai, Drug Discovery, In Silico, PROTAC, Natural Prodrug

Abstrak. Kimia medisinal merupakan bidang multidisipliner yang terus berkembang pesat, mengintegrasikan pendekatan kimia, biologi, dan teknologi informasi untuk penemuan dan pengembangan obat baru. Artikel ini meninjau 20 publikasi terkini yang mencakup pendekatan in silico, pengembangan senyawa alami, strategi PROTAC, peptida terapeutik, prodrug, dan eksplorasi ruang kimia makrosiklik. Literatur diperoleh dari basis data internasional dan nasional termasuk PubMed, Scopus, dan Neliti, dengan fokus pada artikel yang diterbitkan antara 2020–2025. Analisis menunjukkan pergeseran tren menuju penggunaan kecerdasan buatan (AI), integrasi desain berbasis struktur dan sifat fisikokimia, serta peningkatan pemanfaatan scaffold baru. Review ini diharapkan menjadi referensi bagi peneliti dalam mengidentifikasi peluang riset dan strategi optimasi dalam kimia medisinal modern.

Kata kunci: Ai, Penemuan Obat, In Silico, PROTAC, Senyawa Alami

LATAR BELAKANG

Penelitian terkini di bidang kimia medisinal menunjukkan beberapa aspek kebaruan yang sekaligus mengungkap kesenjangan yang perlu segera dijangkiti. Pertama, pada studi Amin (2024) mengenai pendekatan *in silico* untuk resistensi antibiotik, metode docking, QSAR, dan virtual screening memang mampu memprioritaskan kandidat senyawa, namun validasi eksperimental masih sangat terbatas. Urgensi penelitian selanjutnya adalah membangun pipeline validasi biologis yang terintegrasi untuk memperkuat prediksi komputasi tersebut.

Kedua, penelitian evaluasi potensi antikanker senyawa daun kelor Amin (2024) dan eksplorasi senyawa alami untuk kanker payudara memperlihatkan lead compound potensial tetapi belum ada optimasi farmakokinetik serta profil toksisitas yang memadai (Amin, Dewi Maharani, et al., 2025). Hal ini menandakan perlunya strategi sistematis untuk mengubah senyawa alami menjadi kandidat obat yang dapat dikembangkan secara klinis.

Ketiga, studi mengenai PROTAC, seperti yang dibahas Kuemper et al., (2024) menyoroti peluang besar degradasi protein target namun menghadapi tantangan bioavailabilitas dan stabilitas molekul yang rendah untuk pemberian oral. Penelitian lanjutan yang mendesain ulang linker, meningkatkan permeabilitas membran, dan meminimalkan imunogenisitas menjadi sangat mendesak (Amin, Sutaryat, et al., 2025).

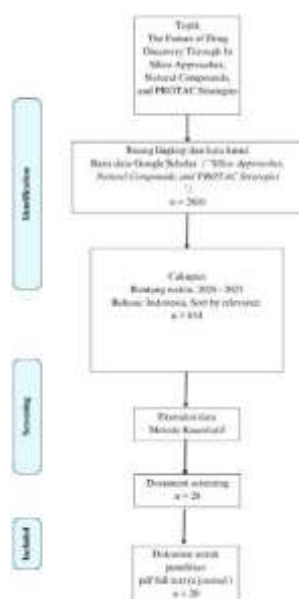
Keempat, strategi prodrug dan eksplorasi ruang kimia terbukti mampu memperbaiki kelarutan, penetrasi sawar darah otak, dan selektivitas jaringan. Namun, kompleksitas sintesis dan variasi aktivasi antarindividu menjadi hambatan besar sehingga perlu inovasi dalam desain prodrug dan metode sintesis makrosiklik agar lebih efisien serta terkontrol (Kuemper et al., 2024)

Kesenjangan tersebut menegaskan urgensi penelitian multidisipliner yang tidak hanya berfokus pada penemuan senyawa baru, tetapi juga pada penyusunan strategi validasi eksperimental, optimasi struktur, dan pengembangan teknologi formulasi agar kandidat obat yang dihasilkan benar-benar siap ditranslasikan ke tahap pra-klinis dan klinis.

Penelitian ini bertujuan untuk merangkum dan menganalisis tren, strategi inovatif, serta tantangan utama yang berkembang di bidang kimia medisinal modern, meliputi pendekatan *in silico* dan kecerdasan buatan, pengembangan senyawa alami dan scaffold baru, strategi PROTAC dan peptida terapeutik, serta inovasi prodrug dan makrosiklus. Melalui pemetaan strategi-strategi tersebut, diharapkan diperoleh gambaran yang komprehensif mengenai peluang riset dan arah optimasi yang dapat mempercepat proses penemuan serta pengembangan kandidat obat yang lebih efektif dan aman pada masa mendatang

METODE PENELITIAN

Artikel dipilih dari basis data Google Scholar dengan kata kunci medicinal chemistry, drug discovery, *in silico*, natural products, PROTAC, prodrug, dan AI. Kriteria inklusi meliputi artikel review atau riset asli yang relevan dengan topik kimia medisinal yang diterbitkan pada periode 2020–2025. Dari hasil pencarian, 20 artikel dipilih dan dianalisis berdasarkan tema, metode, hasil utama, dan keterbatasannya.



HASIL DAN PEMBAHASAN

Pendekatan In Silico dan Kecerdasan Buatan

1. Pemanfaatan Teknik In Silico

Pemanfaatan teknik komputasi seperti molecular docking, QSAR, dan virtual screening telah merevolusi tahap awal penemuan obat. Metode ini memungkinkan peneliti menyaring ribuan senyawa dalam waktu singkat, memprediksi interaksi ligan–reseptor, dan memprioritaskan molekul dengan potensi aktivitas tinggi. Keunggulan lainnya adalah penghematan biaya penelitian serta kemampuan menjangkau ruang kimia yang sangat luas. Meski demikian, keterbatasan validasi eksperimental tetap menjadi hambatan utama. Prediksi yang dihasilkan sering kali tidak sepenuhnya mencerminkan kondisi biologis nyata sehingga pipeline validasi biologis yang terintegrasi menjadi kebutuhan mendesak.

A. Model Generatif Berbasis AI

Selain metode konvensional, model generatif berbasis AI seperti variational autoencoders (VAE), GAN, dan diffusion models mampu menghasilkan struktur molekul baru dengan sifat target yang diinginkan. Model ini mempercepat ide desain molekul baru dan membuka peluang menemukan scaffold yang belum pernah dieksplorasi. Namun, tantangan berupa validitas sintesis, kualitas dataset, dan interpretabilitas model perlu diatasi sebelum implementasi luas pada tahap pra- klinis.

Senyawa Alami dan Scaffold Baru

1. Eksplorasi Senyawa Alami

Senyawa alami tetap memainkan peran penting sebagai sumber lead compound. Berbagai penelitian menunjukkan potensi ekstrak tumbuhan seperti daun kelor yang memiliki aktivitas sitotoksik terhadap sel kanker. Keunggulan senyawa alami terletak pada keberagaman struktur kimia dan kemungkinan interaksi dengan target biologis baru.

Namun, keterbatasan profil farmakokinetik dan toksisitas sering menjadi penghambat. Oleh karena itu, strategi sistematis yang menggabungkan lead optimization berbasis komputasi dan uji eksperimental diperlukan agar senyawa alami siap dikembangkan secara klinis.

A. Tantangan Optimasi Senyawa Aalami

Optimalisasi senyawa alami memerlukan pendekatan multidisipliner meliputi sintesis analog, modifikasi kimia untuk meningkatkan potensi dan selektivitas, serta pengembangan formulasi yang sesuai. Hal ini penting untuk memastikan konsistensi dan keamanan sebelum masuk tahap uji pra-klinis.

1. Scaffold heterosiklik Baru

Selain senyawa alami, pengembangan scaffold heterosiklik baru seperti imidazol, isoksazol, dan oxadiazole membuka peluang untuk menghasilkan molekul dengan mekanisme aksi yang unik. Inovasi metode sintesis modern juga mempermudah akses terhadap kerangka kompleks ini.

a. Inovasi Metode Sintesis

Metode sintesis terkini seperti fotokatalisis atau katalisis logam transisi memungkinkan modifikasi struktur secara lebih efisien. Meski begitu, sifat farmakokinetik dan toksikologi dari scaffold baru ini tetap harus dioptimalkan melalui uji komprehensif.

Tabel 1. Temuan Artikel

NO	Judul Artikel	Jurnal	Tahun	Hasil Utama	Kelemahan
1	Studi in Silico Senyawa Alam sebagai Kandidat Obat Antikanker (Hardian et al., 2025)	Indonesian Research Journal on Education	2025	Senyawa alam seperti kaempferol, stigmasterol, dan squalene menunjukkan afinitas tinggi terhadap target molekuler kanker dengan stabilitas ligan- resepto yang menjanjikan berdasarkan simulasi in silico.	Validasi eksperimental belum dilakukan sehingga aktivitas biologis dan mekanisme molekuler masih sebatas prediksi komputasional.

2	Anticancer Drug Discovery Based on Natural Products: From Computational Approaches to Clinical Studies (Chunarkar-Patil et al., 2024)	Pharmaceuticals (MDPI)	2024	Artikel menyoroti kontribusi senyawa alam dalam penemuan obat antikanker, mengintegrasikan pendekatan komputasi, validasi in vitro/in vivo, serta perkembangan hingga uji klinis beberapa kandidat obat.	Keterbatasan ada pada generalisasi hasil; sebagian besar masih tahap awal sehingga butuh validasi klinis lebih luas.
3	In Silico ADME Methods Used in the Evaluation of Natural Products (Ancuceanu et al., 2025)	Pharmaceutics (MDPI)	2025	Artikel membahas metode komputasi untuk prediksi ADME senyawa alam, mencakup docking, QSAR, MD, hingga PBPK modeling sebagai alternatif cepat dan hemat biaya.	Banyak metode masih disesuaikan dari obat sintetis, sehingga akurasi pada senyawa alam belum sepenuhnya terjamin.

4	PROTAC Technology as a Tool for Modern Pharmacotherapy (Kubryń et al., 20	International Journal of Molecular Sciences (MDPI)	2025	Artikel menyoroti potensi PROTAC sebagai strategi terapi modern dengan aplikasi pada kanker, penyakit neurodegeneratif, hingga infeksi virus, didukung uji klinis awal seperti ARV-471.	Sebagian besar masih tahap eksperimental, dengan tantangan terkait stabilitas, bioavailabilitas, dan keterbatasan data klinis jangka panjang.
5	Peran Kimia Medisinal dalam Pengembangan	Indonesian Journal of Science	2025	Studi menekankan peran molecular docking,	Masih sebatas kajian literatur, belum ada validasi
	Obat Antikanker: Pendekatan Komputasi dan Eksplorasi Senyawa Bioaktif dari Sumber Alam (Amin, Azhari, et al., 2025)			simulasi dinamika molekuler, dan QSAR dalam mengidentifikasi senyawa alam potensial antikanker seperti <i>Ageratum conyzoides</i> dan <i>Averrhoa bilimbi</i> .	eksperimen maupun uji klinis untuk memastikan efektivitas biologis senyawa.

6	In silico screening, ADMET analysis and MD simulations of phytochemicals of <i>Onosma bracteata</i> Wall. as SARS-CoV-2 inhibitors (Vegad et al., 2023)	3 Biotech	2023	Studi mengidentifikasi senyawa Pulmonarioside C dan fitokimia lain <i>Onosma bracteata</i> dengan afinitas tinggi terhadap target SARS-CoV-2 melalui docking, ADMET.	Hasil masih terbatas pada prediksi <i>in silico</i> tanpa validasi biologis maupun uji klinis.
7	Computational strategies for PROTAC drug discovery (Wu et al., 2023)	Applied Medicinal Chemistry (AMM)	2023	Artikel mengulas peran docking dan virtual screening dalam merancang PROTAC, berhasil mengidentifikasi sekitar 12 kandidat dengan target degradasi protein spesifik melalui sistem ubiquitin-proteasome.	Pendekatan masih bergantung pada prediksi komputasi, keterbatasan validasi eksperimental dan kompleksitas interaksi ternary belum sepenuhnya teratasi.

8	PROTAC-Design-Evaluator (PRODE): An Advanced	ACS Omega	2024	Studi memperkenalkan PRODE, metode in silico untuk desain	Masih terbatas pada simulasi komputer, tanpa validasi
	Method for InSilico PROTAC Design (Ben Geoffrey et al., 2023)			PROTAC, berhasil mereproduksi kompleks ternary BRD4-VHL dan merancang degradasi FGFR1 menggunakan pendekatan TTMD.	eksperimental in vitro atau in vivo.
9	Improved Accuracy for Modeling PROTAC-Mediated Ternary Complex Formation and Targeted Protein Degradation via New In Silico Methodologies (Drummond	Journal of Chemical Information and Modeling	2020	Metode komputasi baru meningkatkan akurasi pemodelan kompleks ternary PROTAC, mampu mereproduksi struktur kristal dan memprediksi tren degrada	Hanya diuji pada studi retrospektif, belum ada validasi prospektif eksperimental langsung.

	et al., 2020)			si protein melalui tujuh studi kasus retrospektif.
10	Exploring Experimental and In Silico Approaches for Antibody Drug Conjugates in Oncology Therapies (de Almeida et al., 2025)	Pharmaceutical s	2023	ADCs menggabungkan spesifisitas antibodi dengan potensi obat sitotoksik, ditingkatkan oleh strategi eksperimental dan in silico yang mempercepat desain, optimasi, serta efisiensi terapi kanker.
				Masih berupa tinjauan konseptual, tanpa validasi klinis langsung pada kandidat ADC generasi terbaru.

11	Novel approaches for the rational design of	Exploration of Targeted Anti-tumor Therapy	2020	Penelitian menyyoroti pentingnya desain rasional	Hanya bersifat review konseptual, belum ada uji
	PROTAC linkers (Zagidullin et al., 2020)			linker PROTAC, membahas parameter kimia, panjang, fleksibilitas, serta strategi inovatif seperti CLIPTACs dan photo-switchable PROTACs.	validasi eksperimental sistematis pada kandidat PROTAC baru.
12	In Silico Tools to Extract the Drug Design Information Content of Degradation Data: The Case of PROTACs Targeting the Androgen Receptor (Apprato et al., 2023)	Pharmaceuticals	2021	Studi menggunakan 92 PROTACs AR, menguji analisis degradasi, model machine learning, dan hubungan struktur-aktivitas untuk mendukung desain	Prediksi tidak konsisten pada PROTAC berbasis CRBN, keterbatasan generalisasi hasil.

PROTAC berbasis VHL.					
13	PROTACs bearing piperazine-containing linkers: what effect on their protonation state? (Desantis et al., 2022)	RSC Advances	2022	Studi mengevaluasi pKa dan efek protonasi linker piperazin pada PROTAC, menunjukkan modifikasi kecil memengaruhi sifat fisikokimia dan prediksi <i>in silico</i> .	Studi terbatas pada dataset kecil; generalisasi hasil masih rendah.
14	Conformational Sampling Deciphers the Chameleonic Properties of a VHL-Based Degradere (Ermondi et al., 2023)	Molecules	2021	Studi menunjukkan metode sampling konformasi dapat meniru sifat kameleonik PROTAC-1 sesuai data NMR,	Validasi terbatas pada satu degrader; generalisasi untuk PROTAC lain belum pasti.

membantu prediksi permeabilitas dan desain degrader lebih efektif.

15	Molecular Glues: The Adhesive Connecting Targeted Protein Degradation to the Clinic (Sasso et al., 2023)	Biochemistry	2023	Review menyoroti perkembangan degrader tipe molecular glue, keunggulannya ,serta kemajuan kandidat obat untuk penyakit kanker, infeksi, inflamasi, dan neurodegeneratif.	Masih berbasis literatur; bukti klinis langsung molecular glue masih terbatas.
16	Linkers as Game-changers in PROTAC Technology: Emphasizing General Trends in PROTAC Pharmacokinetics for their Rational Design (Cecchini et al., 2022)	CHIMIA	2022	Review menekankan pentingnya linker dalam PROTAC untuk meningkatkan DMPK, termasuk solubilitas, permeabilitas sel, eflux transporter, dan stabilitas metabolik.	Studi bersifat konseptual, minim data eksperimental in vivo atau uji klinis.

17	Prodrug Approach as a Strategy to Enhance Drug Permeability (de Souza et al., 2025)	Pharmaceutics	2023	Review membahas strategi prodrug untuk meningkatkan permeabilitas obat, termasuk aplikasi pada PROTACs, dengan contoh obat pasar dan tren teknologi baru	Lebih fokus pada literatur, kurang data eksperimental langsung atau validasi klinis.
18	In Silico Tools in PROTACs Design (Wei, 2023)	Mini Review	2023	Review merangkum pemanfaatan alat <i>in silico</i> dalam desain PROTACs untuk mempercepat pengembangan, termasuk prediksi permeabilitas sel, desain linker, dinamika molekuler, dan analisis kinetik	Minim data validasi eksperimental; lebih bersifat teoritis konseptual.

19	Mechanistic and Structural Features of PROTAC Ternary Complexes (Herbert & Kappauf, 2021)	Springer Science	2023	Menjelaskan mekanisme kompleks ternary PROTAC, termasuk model tiga komponen, kooperativitas, hook effect, serta metode biophysical (X-ray, ITC, SPR) untuk mempelajari degradasi protein.	Terlalu teoritis, minim validasi in vivo sehingga aplikasinya ke klinik masih terbatas.
20	Targeted Protein Degradation for Infectious Diseases: from Basic Biology to Drug Discovery (Espinoza-Chávez et al., 2023)	ACS Bio Med Chem Au	2023	Mengulas potensi PROTACs sebagai strategi anti-infeksi inovatif, menyoroti manfaatnya terhadap resistensi antimikroba, target undruggable, kombinasi terapi.	Masih tahap awal, riset terbatas pada studi kasus in vitro dan belum ada bukti klinis kuat.

KESIMPULAN DAN SARAN

Penelitian ini menyimpulkan bahwa perkembangan kimia medisinal modern semakin bergeser menuju integrasi pendekatan in silico, kecerdasan buatan, dan pemanfaatan senyawa alami serta strategi degradasi protein seperti PROTAC. Analisis terhadap 20 publikasi menunjukkan bahwa kombinasi pendekatan komputasi dengan validasi eksperimental menjadi kunci dalam mempercepat penemuan kandidat obat yang

efektif dan aman. Meskipun kemajuan signifikan telah dicapai, tantangan utama masih terletak pada keterbatasan validasi biologis, optimasi farmakokinetik, serta efisiensi sintesis senyawa kompleks. Oleh karena itu, penelitian mendatang perlu difokuskan pada penguatan kolaborasi multidisipliner antara kimia, biologi, dan teknologi informasi guna mengoptimalkan proses translasi hasil komputasi ke tahap pra-klinis dan klinis secara lebih akurat dan berkelanjutan.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya atas dukungan akademik dan fasilitas penelitian yang telah diberikan. Artikel ini merupakan bagian dari kajian literatur dalam bidang kimia medisinal yang disusun untuk memperkaya referensi ilmiah mengenai inovasi penemuan obat modern. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada seluruh peneliti yang hasil karyanya menjadi sumber utama dalam penyusunan artikel ini.

DAFTAR PUSTAKA

- Amin, S., Azhari, R. A., Nurmalia, F. R., Pujawati, L., Hamidah, S., & Sopiurrohman, M. L. (2025). Peran Kimia Medisinal dalam Pengembangan Obat Antikanker: Kajian Literatur tentang Senyawa Bioaktif dari Sumber Alam. *Jurnal Ners*, 9(2), 2987–2992. <https://doi.org/10.31004/jn.v9i2.44578>
- Amin, S., Dewi Maharani, K., Program,), Farmasi, S., Bakti, U., & Husada, T. (2025). Eksplorasi Senyawa Bioaktif Tumbuhan Lokal Sebagai Antioksidan Neuroprotektif Untuk Terapi Alzheimer. *Indonesian Journal of Science*, 1(6), 1369–1375.
- Amin, S., Mustafidah, S., Nabila, N. S., & Maharani, C. (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.v4i1.4561>
- Amin, S., Sutaryat, L. D., Yuniar, L. U., & Haryana, Y. (2025). Kajian Literatur : Eksplorasi Metabolit Sekunder Tanaman Lokal Indonesia sebagai Terapi Alami Kanker Payudara. *Journal of Innovative and Creativity (Joecy)*, 5(2), 231–239. <https://doi.org/10.31004/joecy.v5i2.163>
- Ancuceanu, R., Lascu, B. E., Drăgănescu, D., & Dinu, M. (2025). *In Silico* ADME Methods Used in the Evaluation of Natural Products. *Pharmaceutics*, 17(8), 1002. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics17081002>
- Apprato, G., D'Agostini, G., Rossetti, P., Ermondi, G., & Caron, G. (2023). *In Silico* Tools to Extract the Drug Design Information Content of Degradation Data: The Case of PROTACs Targeting the Androgen Receptor. *Molecules*,
- Ben Geoffrey, A. S., Agrawal, D., Kulkarni, N. M., Vetrivel, R., & Gurram, K. (2023). PROTAC-Design-Evaluator (PRODE): An Advanced Method for *In-Silico*

- PROTAC Design. *ACS Omega*. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c07318>
- Cecchini, C., Tardy, S., & Scapozza, L. (2022). Linkers as Game-changers in PROTAC Technology: Emphasizing General Trends in PROTAC Pharmacokinetics for their Rational Design. *Chimia*, 76(4), 341–345. <https://doi.org/10.2533/chimia.2022.341>
- Chunarkar-Patil, P., Kaleem, M., Mishra, R., Ray, S., Ahmad, A., Verma, D., Bhayye, S., Dubey, R., Singh, H. N., & Kumar, S. (2024). Anticancer Drug Discovery Based on Natural Products: From Computational Approaches to Clinical Studies. *Biomedicines*, 12(1), 1–35. <https://doi.org/10.3390/biomedicines12010201>
- de Almeida, V. M., Soares, M. B. P., & Santos-Filho, O. A. (2025). Exploring Experimental and In Silico Approaches for Antibody–Drug Conjugates in Oncology Therapies. *Pharmaceuticals*, 18(8), 1–32. <https://doi.org/10.3390/ph18081198>
- de Souza, M. M., Gini, A. L. R., Moura, J. A., Scarim, C. B., Chin, C. M., & dos Santos, J. L. (2025). Prodrug Approach as a Strategy to Enhance Drug Permeability. *Pharmaceuticals*, 18(3). <https://doi.org/10.3390/ph18030297>
- Desantis, J., Mammoli, A., Eleuteri, M., Coletti, A., Croci, F., Macchiarulo, A., & Goracci, L. (2022). PROTACs bearing piperazine-containing linkers: what effect on their protonation state? *RSC Advances*, 12(34), 21968–21977. <https://doi.org/10.1039/d2ra03761k>
- Drummond, M. L., Henry, A., Li, H., & Williams, C. I. (2020). Improved accuracy for modeling ProTAC-mediated ternary complex formation and targeted protein degradation via new in silico methodologies. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 60(10), 5234–5254. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.0c00897>
- Ermondi, G., Jimenez, D. G., Rossi Sebastiano, M., Kihlberg, J., & Caron, G. (2023). Conformational Sampling Deciphers the Chameleonic Properties of a VHL-Based Degradator. *Pharmaceutics*, 15(1). <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15010272>
- Espinoza-Chávez, R. M., Salerno, A., Liuzzi, A., Ilari, A., Milelli, A., Uliassi, E., & Bolognesi, M. L. (2023). Targeted Protein Degradation for Infectious Diseases: from Basic Biology to Drug Discovery. *ACS Bio and Med Chem Au*, 3(1), 32–45. <https://doi.org/10.1021/acsbiochemau.2c00063>
- Hardian, A., Sitepu, E., Mulyapradana, A., Sitopu, J. W., Wardono, B. H., Bina, U., Informatika, S., Agung, U. D., & Simalungun, U. (2025). Studi in Silico Senyawa Alam sebagai Kandidat Obat Antikanker. *Indonesian Research Journal on Education*, 5, 1079–1085.
- Herbert, W., & Kappauf, H. W. (2021). *Metadata of the chapter that will be visualized online Spontanremissionen* (Issue March). <https://doi.org/10.1007/978-1-0716-1665-9>
- Kubryń, N., Fijałkowski, Ł., Nowaczyk, J., Jamil, A., & Nowaczyk, A. (2025).
- Kuemper, S., Cairns, A. G., Birchall, K., Yao, Z., & Large, J. M. (2024). Targeted protein degradation in CNS disorders: a promising route to novel therapeutics? *Frontiers in Molecular Neuroscience*, 17(April), 1–9.

<https://doi.org/10.3389/fnmol.2024.1370509>

Molecules, 30(10). <https://doi.org/10.3390/molecules30102123>

PROTAC Technology as a New Tool for Modern Pharmacotherapy.

Sasso, J. M., Tenchov, R., Wang, D. S., Johnson, L. S., Wang, X., & Zhou, Q. A. (2023). Molecular Glues: The Adhesive Connecting Targeted Protein Degradation to the Clinic. *Biochemistry*, 62(3), 601–623. <https://doi.org/10.1021/acs.biochem.2c00245>

Vegad, U. G., Gajjar, N. D., Nagar, P. R., Chauhan, S. P., Pandya, D. J., & Dhameliya, T. M. (2023). In silico screening, ADMET analysis and MD simulations of phytochemicals of *Onosma bracteata* Wall. as SARS CoV-2 inhibitors. *3 Biotech*, 13(7), 1–15. <https://doi.org/10.1007/s13205-023->

Wei, M. (2023). *In Silico Tools in PROTACs design*. <http://arxiv.org/abs/2307.01320>

Wu, J., Wang, W., & Leung, C. H. (2023). Computational strategies for PROTAC drug discovery. *Acta Materia Medica*, 2(1), 42–53. <https://doi.org/10.15212/AMM-2022-0041>

Zagidullin, A., Milyukov, V., Rizvanov, A., & Bulatov, E. (2020). Novel approaches for the rational design of PROTAC linkers. *Exploration of Targeted Anti-Tumor Therapy*, 1(5), 381–390. <https://doi.org/10.37349/etat.2020.00023>