



Eksplorasi Senyawa Alam Tanaman Obat dalam Desain Obat Modern: Integrasi Pendekatan Kimia Medisinal dan In Silico

Saeful Amin

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Neng Mirna Wati Dewi

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

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

Korespondensi penulis: nengmirnawatidewi@gmail.com

Abstract: Modern drug discovery based on natural compounds has continued to advance alongside the integration of medicinal chemistry approaches and in silico technologies, which enhance efficiency and predictive accuracy in molecular design. This study aims to evaluate the potential of bioactive compounds derived from medicinal plants as candidates for modern drug development through medicinal chemistry approaches and computational simulations. The population of this study comprises scientific articles addressing the exploration of natural compounds from medicinal plants in modern drug development, while the sample consists of selected articles published between 2020 and 2025 that met the inclusion criteria. The research method employed was a systematic literature review conducted through searches of reputable scientific databases, including PubMed, Scopus, and ScienceDirect. Data were analyzed using a descriptive qualitative approach through thematic analysis and narrative synthesis. The findings indicate that compounds such as curcumin, gingerol, kaempferol, and daucosterol exhibit high binding affinities toward biological targets and favorable pharmacokinetic profiles based on ADMET predictions. In conclusion, the integration of medicinal chemistry and in silico approaches plays a crucial role in accelerating the identification and optimization of natural compounds as effective and safe drug candidates

Keywords: Medicinal Chemistry, In silico, Molecular Docking, ADMET, Natural Compounds

Abstrak : Penemuan obat modern berbasis senyawa alam semakin berkembang seiring integrasi pendekatan kimia medisinal dan teknologi *in silico* yang mampu meningkatkan efisiensi serta prediktivitas dalam desain molekuler. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa bioaktif dari tanaman obat sebagai kandidat obat modern melalui pendekatan kimia medisinal dan simulasi komputasi. Populasi dalam penelitian ini adalah artikel ilmiah yang membahas eksplorasi senyawa alam tanaman obat dalam pengembangan obat modern, sedangkan sampel berupa artikel terpilih yang dipublikasikan pada periode 2020–2025 dan memenuhi kriteria inklusi. Metode penelitian yang digunakan adalah *systematic literature review* dengan penelusuran pada basis data ilmiah bereputasi seperti PubMed, Scopus, dan ScienceDirect. Data dianalisis secara deskriptif-kualitatif melalui analisis tematik dan sintesis naratif. Hasil kajian menunjukkan bahwa senyawa seperti kurkumin, gingerol, kaempferol, dan daucosterol memiliki afinitas pengikatan yang tinggi terhadap target biologis serta profil farmakokinetik yang mendukung berdasarkan prediksi ADMET. Kesimpulan dari penelitian ini menunjukkan bahwa integrasi pendekatan kimia medisinal dan *in silico* berperan penting dalam mempercepat identifikasi dan optimasi senyawa alam sebagai kandidat obat yang efektif dan aman.

Kata kunci: ADMET, In Silico, Kimia Medisinal, Molecular Docking, Senyawa Alam

PENDAHULUAN

Penemuan dan pengembangan obat baru merupakan suatu proses yang kompleks, multidisipliner, dan sarat tantangan, terutama di era modern yang ditandai oleh meningkatnya

Received Februari 17, 2026; Revised Februari 18, 2026; Accepted Februari 19, 2026

*Saeful Amin, nengmirnawatidewi@gmail.com

kompleksitas penyakit, resistensi antimikroba yang meluas, serta keterbatasan efektivitas terapi konvensional. Dalam konteks ini, senyawa alam telah lama diakui sebagai salah satu sumber utama inspirasi dalam penciptaan obat-obatan modern. Keanekaragaman struktural, kompleksitas stereokimia, dan bioaktivitas alami dari metabolit sekunder menjadikan produk alam, khususnya yang berasal dari tanaman obat, sebagai tulang punggung farmakologi terapeutik selama lebih dari satu abad. Berdasarkan kajian retrospektif terhadap obat-obatan yang disetujui oleh FDA, diketahui bahwa lebih dari 60% di antaranya merupakan produk alam, derivatif semisintetik, atau analog sintetis dari senyawa bioaktif alami. Namun demikian, tidak dapat disangkal bahwa kendati memiliki potensi biofarmakologis yang tinggi, pemanfaatan produk alam dalam desain obat modern masih menghadapi berbagai kendala, antara lain kompleksitas isolasi, rendahnya kelarutan dalam air, bioavailabilitas yang terbatas, serta ketidakstabilan metabolik.

Perkembangan dalam bidang kimia medisinal telah memberikan solusi signifikan dalam mengatasi keterbatasan-keterbatasan tersebut. Kimia medisinal sebagai cabang ilmu interdisipliner berfungsi untuk mengidentifikasi, mengoptimasi, dan mensintesis molekul-molekul bioaktif yang memiliki potensi sebagai kandidat obat. Integrasi pendekatan eksperimental dan komputasional, seperti modifikasi struktural, pemodelan farmakofor, studi hubungan struktur-aktivitas (*structure-activity relationship* atau SAR), hingga simulasi *in silico*, telah secara nyata mempercepat proses skrining senyawa dan meningkatkan efektivitas desain obat. Pendekatan *in silico*, khususnya, menjadi alat bantu strategis untuk mengevaluasi interaksi molekul terhadap target biologis melalui *molecular docking*, memprediksi parameter farmakokinetik dan toksikologi melalui ADMET modeling, serta mengidentifikasi fitur kimia esensial melalui QSAR dan *pharmacophore* modeling. Terlepas dari berbagai kemajuan tersebut, integrasi sistematis antara senyawa alam dan pendekatan kimia medisinal modern masih sangat terbatas dan belum dimaksimalkan, terutama dalam konteks senyawa alam dari biodiversitas tropis yang kaya namun kurang terdokumentasi.

Sejumlah penelitian terbaru memperlihatkan bahwa masih terdapat kesenjangan ilmiah (*research gaps*) yang perlu dijembatani. Studi oleh (de Jesus Silva et al., 2025) menunjukkan bahwa meskipun berbagai senyawa alkaloid dan flavonoid dari tumbuhan menunjukkan aktivitas sebagai inhibitor enzim monoamine oxidase B, penggunaan pendekatan *pharmacophore*-based virtual screening terhadap senyawa tersebut masih sangat terbatas, khususnya untuk spesies tanaman dari Asia Tenggara dan wilayah tropis lainnya. Kajian ini menekankan perlunya perluasan basis data molekular dan pemanfaatan teknologi prediktif dalam eksplorasi tanaman lokal (de Jesus Silva et al., 2025). Selain itu, (Abdul Rahaman et al., 2025) menyoroti bahwa struktur kimia yang kompleks dari produk alam dapat menyulitkan penerapan metode SAR yang sistematis, padahal teknik ini sangat penting dalam proses pengembangan derivatif struktural dengan potensi antikanker yang tinggi. Studi mereka menunjukkan bahwa modifikasi semisintetik terhadap produk alam berhasil meningkatkan potensi sitotoksik, namun tanpa pendekatan kimia medisinal yang terarah, potensi optimal dari senyawa-senyawa tersebut seringkali tidak terealisasi (Abdul Rahaman et al., 2025).

Penerapan teknologi pembelajaran mesin (*machine learning*) untuk pemilihan kandidat senyawa obat juga masih jarang digunakan untuk senyawa berbasis alam. Studi oleh (Aiello et al., 2025) mendemonstrasikan bahwa teknik ini efektif untuk menyaring senyawa antiparasit yang aman, namun keterbatasan pada data struktural dan bioprospeksi dari tanaman lokal tetap menjadi kendala utama (Aiello et al., 2025). Adapun studi oleh (Zhao et al., 2025) mengenai sintesis total dan modifikasi senyawa *salidroside* menyoroti kebutuhan eksplorasi analog semi-sintetik yang lebih luas. *Salidroside*, sebagai senyawa dengan potensi neuroprotektif, telah menunjukkan efektivitas biologis, tetapi keterbatasan biofarmasetikalnya menuntut adanya pendekatan optimasi molekular melalui kimia medisinal dan simulasi *in silico* yang terarah (Zhao et al., 2025). Lebih lanjut, penelitian oleh (Khan et al., 2025) yang mengembangkan turunan karbon dari senyawa alam untuk melawan infeksi *Candida albicans* menunjukkan hasil yang menjanjikan dalam menghindari resistensi obat. Namun, studi ini juga menegaskan bahwa mekanisme aksi molekuler

dari senyawa tersebut belum sepenuhnya dipahami dan masih sangat bergantung pada eksplorasi *in silico* untuk mengidentifikasi target biologis secara lebih presisi (Khan et al., 2025).

Melihat berbagai temuan tersebut, dapat disimpulkan bahwa meskipun potensi senyawa alam sebagai sumber agen terapeutik sangat besar, pemanfaatannya belum maksimal dalam kerangka kerja desain obat modern yang berbasis data dan teknologi prediktif. Oleh karena itu, kajian literatur ini menjadi sangat penting untuk menjembatani celah antara eksplorasi senyawa alami dengan pengembangan obat berbasis pendekatan kimia medisinal dan *in silico*. Kajian ini bertujuan untuk menyajikan tinjauan komprehensif terhadap perkembangan terbaru dalam penemuan obat berbasis senyawa alam dari tanaman obat, serta mengevaluasi integrasi pendekatan kimia medisinal, khususnya teknik *in silico*, dalam mendukung desain, skrining, dan optimasi molekul kandidat obat. Dengan mengkaji secara kritis kontribusi metode eksperimental dan komputasional terhadap pemanfaatan senyawa alami, artikel ini diharapkan dapat memberikan kontribusi ilmiah yang bermakna dalam memperkuat fondasi riset farmasi berbasis biodiversitas, mendorong efisiensi pengembangan obat baru, dan membuka peluang kolaborasi multidisipliner dalam sains kesehatan global.

Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk menyajikan tinjauan sistematis mengenai eksplorasi senyawa alam dari tanaman obat serta mengevaluasi peran integrasi pendekatan kimia medisinal dan teknologi *in silico* dalam mendukung desain, skrining, dan optimasi kandidat obat modern.

METODE PENELITIAN

Waktu dan Lokasi Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan pada periode Juni hingga September 2025. Lokasi penelitian bersifat non-lapangan, yaitu melalui penelusuran literatur secara daring menggunakan basis data ilmiah internasional seperti PubMed, Scopus, ScienceDirect, MDPI, dan SpringerLink.

Jenis dan Desain Penelitian

Jenis penelitian ini adalah studi pustaka sistematis (*systematic literature review*) yang bertujuan untuk mengkaji, mengevaluasi, dan mensintesis temuan-temuan ilmiah terkini mengenai eksplorasi senyawa alam dari tanaman obat dan aplikasinya dalam desain obat berbasis kimia medisinal, termasuk pemanfaatan pendekatan *in silico*. Penelitian ini menggunakan pendekatan deskriptif-kualitatif dengan desain sistematis dan naratif, yang mengedepankan analisis kritis terhadap data sekunder dari publikasi ilmiah terindeks.

Desain review sistematis dipilih karena memungkinkan identifikasi tren ilmiah, penyusunan sintesis teoritis yang kuat, serta pemetaan kesenjangan penelitian yang relevan dengan topik. Artikel ini tidak melakukan eksperimen laboratorium (*wet-lab*), melainkan mengandalkan penilaian metodologis terhadap penelitian-penelitian primer yang sudah dipublikasikan, khususnya dalam kurun waktu 5 tahun terakhir (2020–2025).

Populasi dan Teknik Pengambilan Sampel Penelitian

Dalam penelitian ini, populasi yang menjadi sasaran kajian adalah seluruh artikel ilmiah yang membahas tentang penemuan dan pengembangan obat berbasis senyawa alam, khususnya yang berasal dari tanaman obat, serta penerapan pendekatan kimia medisinal, termasuk di dalamnya metode *in silico* seperti *molecular docking*, *pharmacophore modeling*, *QSAR*, dan *ADMET prediction*. Populasi ini mencakup artikel yang dipublikasikan dalam kurun waktu lima tahun terakhir (2020–2025) pada jurnal-jurnal bereputasi yang terindeks secara internasional, seperti Scopus, Web of Science, PubMed, dan ScienceDirect. Pemilihan artikel dilakukan secara selektif menggunakan teknik *purposive sampling*, yaitu pemilihan sampel berdasarkan pertimbangan kesesuaian dan relevansi artikel dengan fokus dan tujuan penelitian. Artikel yang dimasukkan dalam analisis harus memenuhi kriteria inklusi tertentu, yakni (1) memuat pembahasan eksplisit tentang eksplorasi atau pemanfaatan tanaman obat sebagai sumber senyawa bioaktif, (2) mengintegrasikan pendekatan kimia medisinal dalam proses pengembangan senyawa kandidat obat, dan (3) melibatkan atau membahas aplikasi teknik *in silico* dalam validasi atau optimasi senyawa. Sebaliknya, artikel yang tidak memenuhi syarat tersebut, seperti artikel non-

ilmiah, studi hewan yang tidak relevan, laporan tanpa data eksperimen atau komputasional yang mendalam, serta artikel yang tidak tersedia dalam versi *full-text*, dikeluarkan dari kajian. Dengan pendekatan ini, penelitian dapat menjamin bahwa data yang dianalisis bersumber dari publikasi yang kredibel, terkini, dan benar-benar merepresentasikan perkembangan ilmiah yang relevan dalam bidang kimia medisinal berbasis senyawa alam.

Instrumen Pengumpulan Data

Dalam penelitian ini, instrumen pengumpulan data yang digunakan adalah lembar pencatatan data sederhana yang disusun dalam bentuk tabel atau spreadsheet untuk merekam informasi penting dari setiap artikel ilmiah yang dikaji. Instrumen ini digunakan untuk mempermudah proses pengumpulan dan pencatatan data secara sistematis, sehingga setiap artikel yang relevan dapat dianalisis secara konsisten. Beberapa informasi utama yang dicatat meliputi: judul artikel, nama penulis, tahun terbit, jurnal tempat artikel dipublikasikan, serta topik utama artikel. Selain itu, dicatat juga jenis tanaman obat yang digunakan, jenis senyawa aktif yang dikaji, pendekatan kimia medisinal yang digunakan (baik secara eksperimental maupun *in silico*), serta hasil utama penelitian, seperti aktivitas biologis yang diteliti dan kesimpulan yang disampaikan penulis. Dengan menggunakan instrumen sederhana ini, peneliti dapat menyusun data dengan lebih terstruktur dan efisien, sekaligus mempermudah dalam proses analisis dan penyusunan hasil kajian secara keseluruhan.

Alat Analisis Data

Alat analisis data dalam penelitian ini menggunakan pendekatan analisis tematik dan sintesis naratif yang disesuaikan dengan karakteristik studi literatur sistematis. Analisis tematik digunakan untuk mengidentifikasi, mengelompokkan, dan menafsirkan pola-pola utama (themes) yang muncul secara berulang dalam artikel-artikel yang dikaji, seperti jenis tanaman obat yang paling banyak diteliti, kelompok senyawa aktif yang dominan (misalnya alkaloid, flavonoid, terpenoid), serta pendekatan kimia medisinal dan *in silico* yang paling sering digunakan. Selanjutnya, sintesis naratif digunakan untuk menyusun informasi yang telah dikumpulkan menjadi sebuah uraian deskriptif yang koheren, runtut, dan bermakna. Sintesis ini tidak hanya menyajikan data secara deskriptif, tetapi juga membandingkan temuan dari berbagai sumber untuk menilai kesamaan, perbedaan, dan kontribusi masing-masing studi terhadap pengembangan obat berbasis senyawa alam. Dalam proses ini, peneliti juga mempertimbangkan kualitas metodologi dari setiap artikel, serta konteks ilmiah dan aplikatif dari hasil penelitian yang dilaporkan. Dengan menggunakan pendekatan ini, data yang bersifat kualitatif dari berbagai artikel ilmiah dapat diintegrasikan secara sistematis untuk menjawab pertanyaan penelitian secara menyeluruh, serta memberikan gambaran yang utuh mengenai tren, tantangan, dan arah perkembangan ilmu kimia medisinal berbasis produk alam.

Prosedur Penelitian

Prosedur penelitian dalam studi ini dilaksanakan melalui beberapa tahapan sistematis dan terstruktur yang dirancang untuk menjamin validitas dan integritas proses kajian literatur. Tahap pertama dimulai dengan perumusan topik dan pertanyaan penelitian, yang difokuskan pada eksplorasi senyawa alam dari tanaman obat dan pemanfaatannya dalam desain obat berbasis pendekatan kimia medisinal, khususnya teknik *in silico*. Pertanyaan penelitian diarahkan untuk mengidentifikasi sejauh mana senyawa alam telah dimanfaatkan dalam pengembangan obat, metode kimia medisinal apa saja yang digunakan, serta bagaimana integrasi pendekatan *in silico* dapat memperkuat efektivitas desain molekul bioaktif.

Tahap kedua adalah perencanaan strategi pencarian literatur ilmiah. Pencarian dilakukan melalui beberapa basis data elektronik utama yang kredibel dan terindeks internasional seperti Scopus, PubMed, ScienceDirect, MDPI, dan SpringerLink, dengan menggunakan kata kunci tertentu seperti “natural product drug discovery”, “medicinal chemistry”, “plant-based compounds”, “*in silico* drug design”, “molecular docking”, “pharmacophore modeling”, dan

“QSAR”. Kombinasi kata kunci dilakukan dengan operator Boolean seperti AND dan OR untuk memperluas jangkauan pencarian namun tetap menjaga relevansi.

Tahap ketiga adalah seleksi artikel, yang dilakukan melalui dua langkah: penyaringan awal berdasarkan judul dan abstrak, dan seleksi lanjutan berdasarkan full-text untuk memastikan bahwa artikel memenuhi kriteria inklusi. Artikel yang dipilih harus memenuhi beberapa syarat: diterbitkan antara tahun 2020 hingga 2025, ditulis dalam bahasa Inggris atau Indonesia, berasal dari jurnal ilmiah yang terindeks, serta membahas secara eksplisit tentang senyawa alam dari tanaman obat dan penerapan pendekatan kimia medisinal. Artikel yang tidak memenuhi kriteria ini, atau tidak tersedia dalam versi teks lengkap, dikeluarkan dari analisis.

Tahap keempat adalah ekstraksi data, yaitu proses pencatatan informasi penting dari setiap artikel menggunakan instrumen pengumpulan data berupa formulir atau tabel pencatatan. Informasi yang dikumpulkan mencakup identitas artikel, jenis tanaman dan senyawa yang dikaji, target biologis, pendekatan kimia medisinal dan *in silico* yang digunakan, serta hasil utama dan kesimpulan penelitian.

Tahap kelima adalah analisis data, yang dilakukan dengan pendekatan analisis tematik dan sintesis naratif. Peneliti mengelompokkan data berdasarkan tema tertentu seperti jenis tanaman obat, teknik *in silico* yang digunakan, aktivitas farmakologis yang diteliti, dan metode optimasi struktur senyawa. Temuan-temuan ini kemudian disusun secara naratif untuk membentuk pemahaman yang mendalam mengenai tren, tantangan, dan prospek pengembangan obat dari senyawa alam melalui pendekatan kimia medisinal.

Tahap terakhir adalah penyusunan hasil dan interpretasi temuan, yang dituangkan dalam bentuk artikel review ilmiah. Dalam tahap ini, seluruh informasi yang telah dianalisis dikonsolidasikan untuk membangun argumen yang kuat, menyampaikan kontribusi ilmiah kajian, dan merumuskan kesimpulan serta rekomendasi untuk penelitian lanjutan. Prosedur ini dilaksanakan secara hati-hati dan berulang untuk meminimalkan bias seleksi dan interpretasi, serta menjamin akurasi informasi yang disampaikan dalam artikel review ini.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Pengumpulan data dalam studi ini dilakukan dengan menelusuri artikel-artikel ilmiah yang relevan melalui beberapa basis data akademik yang diakui secara internasional, yaitu PubMed, Scopus, ScienceDirect, SpringerLink, dan MDPI. Pencarian artikel dilakukan selama rentang waktu Juni hingga September 2025. Penelitian ini tidak terbatas pada wilayah geografis tertentu karena bersifat global, namun terdapat fokus pada studi yang membahas eksplorasi tanaman obat dari kawasan tropis, terutama Asia Tenggara, mengingat kekayaan biodiversitasnya yang tinggi. Artikel yang dipilih mencakup periode publikasi antara tahun 2020 hingga 2025, dengan tujuan untuk meninjau perkembangan terkini dalam integrasi senyawa alam dan pendekatan kimia medisinal modern.

Eksplorasi Potensi Bahan Alam dengan Metode *In Silico*

Studi *in silico* merupakan pendekatan berbasis komputer yang digunakan secara luas dalam penemuan dan pengembangan obat, khususnya dalam bidang kimia medisinal. Secara etimologis, istilah *in silico* mengacu pada simulasi eksperimental yang dilakukan dengan bantuan algoritma komputer, sebagai padanan dari studi *in vivo* (di dalam makhluk hidup) dan *in vitro* (di luar makhluk hidup). Dalam konteks kimia medisinal, pendekatan ini mencakup teknik seperti *molecular docking*, *virtual screening*, *quantitative structure-activity relationship* (QSAR), serta *pharmacophore modeling*, yang semuanya bertujuan untuk memprediksi interaksi antara senyawa kimia dengan target biologis secara efisien dan sistematis (Pires et al., 2022).

Salah satu metode paling populer dalam studi *in silico* adalah *molecular docking*, yang memodelkan bagaimana suatu molekul (biasanya senyawa aktif dari tanaman atau sintetis) berikatan dengan target biologis, seperti protein enzimatik atau reseptor sel. Mekanisme ini bekerja dengan mengidentifikasi konformasi terbaik dari ligan saat berinteraksi dengan situs aktif protein target dan menghitung afinitas ikatannya berdasarkan energi bebas Gibbs. Semakin rendah energi ikatan (*binding energy*), semakin tinggi afinitas dan potensi aktivitas biologis

senyawa tersebut (Ntie-Kang et al., 2023). Proses ini dapat mempercepat seleksi kandidat obat potensial tanpa harus melakukan eksperimen laboratorium secara menyeluruh di tahap awal.

Hubungan antara studi *in silico* dan kimia medisinal sangat erat karena kimia medisinal tidak hanya berfokus pada sintesis senyawa bioaktif, tetapi juga pada optimasi struktur molekul agar dapat berinteraksi secara spesifik dan efisien dengan target farmakologis. Dalam hal ini, studi *in silico* dapat membantu memahami hubungan struktur-aktivitas (SAR), menentukan properti farmakokinetik (ADME/T), dan mengurangi risiko toksisitas sejak tahap awal (Alamri et al., 2023). Pendekatan ini juga sangat penting dalam era pascapandemi, di mana efisiensi dan kecepatan pengembangan obat menjadi prioritas, seperti terlihat pada eksplorasi senyawa herbal terhadap protein SARS-CoV-2.

Selain efisiensi waktu dan biaya, studi *in silico* juga membuka peluang lebih besar untuk eksplorasi tanaman obat yang kaya akan metabolit sekunder. Banyak penelitian terbaru memanfaatkan basis data kimia alam (seperti ZINC, PubChem, dan NPASS) untuk menskrining senyawa bioaktif dan mengevaluasi potensi interaksi dengan target enzim, termasuk α -glukosidase, COX-2, TNF- α , dan DNA gyrase, yang merupakan target penting dalam terapi antidiabetes, antiinflamasi, dan antibakteri (Thakur et al., 2022). Melalui simulasi *molecular docking*, para peneliti dapat menilai ligan-ligan dengan skor tertinggi dan mengevaluasi profil ADMET-nya sebelum melangkah ke tahap sintesis atau formulasi.

Walaupun sangat menjanjikan, pendekatan *in silico* juga memiliki keterbatasan. Validitas prediksi sangat tergantung pada kualitas struktur protein target, algoritma yang digunakan, dan parameter simulasi. Oleh karena itu, hasil dari studi *in silico* harus dikonfirmasi lebih lanjut melalui pendekatan *in vitro* dan *in vivo* untuk memastikan efektivitas dan keamanan senyawa dalam kondisi biologis sebenarnya (Muthukrishnan et al., 2023). Secara keseluruhan, studi *in silico* telah menjadi pilar penting dalam kimia medisinal modern, tidak hanya untuk mempercepat skrining senyawa bioaktif dari tanaman obat, tetapi juga dalam proses rasionalisasi desain obat baru. Kombinasi antara teknologi komputasi, basis data kimia, dan pendekatan farmakologi molekuler menjadikan *in silico* strategi yang sangat strategis dalam era pengembangan obat berbasis bukti dan efisiensi.

Tabel 1. Hasil Analisis Artikel Penelitian

No	Judul Artikel	Tanaman Obat	Metode	Hasil Temuan
(Sameer & Aria, 2025)	In Vitro Anti-Diabetic Screening of Phytochemicals Coupled with In Silico Docking Against Key Metabolic Enzymes	Curcuma longa (kunyit), Zingiber officinale (jahe), Trigonella foenum-graecum (klabet)	In vitro, molecular docking, ADME prediction	Senyawa kurkumin, gingerol, dan diosgenin menunjukkan afinitas ikatan tinggi terhadap enzim α -glukosidase dengan energi -8,9 hingga -10,2 kcal/mol. Profil ADME menunjukkan kurkumin memiliki permeabilitas usus yang baik dan tidak bersifat hepatotoksik.
(Badi & Hussa in, 2025)	Curculigo pilosa-Derived Compounds in the Modulation of Carbohydrate-	Curculigo pilosa	In vitro, molecular docking	Senyawa norlignan dan curculigoside dari umbi C. pilosa mampu menghambat enzim α -amilase dengan nilai IC ₅₀ sekitar 35 μ g/mL. Hasil docking menunjukkan afinitas

	Digesting Enzymes			kuat dengan α -glukosidase (-9,1 kcal/mol).
(Mirza & Hussain, 2025)	Phytochemical Profiling and Pharmacokinetics of Curculigo pilosa in α -Amylase Inhibition	Curculigo pilosa	LC-MS, molecular docking, ADME	Profil fitokimia mengidentifikasi senyawa fenolik dan steroidal saponin. Docking terhadap α -amilase menunjukkan energi ikatan hingga -10,4 kcal/mol. Senyawa aktif diprediksi memiliki kelarutan baik dan bioavailabilitas tinggi tanpa efek toksik.
(Nasir Sultan Sharif Ali et al., 2025)	Comparative In Vitro and In Silico Assessment of Blighia welwitschii and Curculigo pilosa Phytochemicals	Blighia welwitschii, Curculigo pilosa	In vitro, molecular docking, ADMET	Senyawa blighioside dan curculigoside menunjukkan aktivitas penghambatan enzim dengan $IC_{50} < 50 \mu\text{g/mL}$. Energi docking berkisar antara -8,7 hingga -9,8 kcal/mol terhadap α -glukosidase. Prediksi farmakokinetik menunjukkan profil ADME yang aman.
(Badi & Ali, 2025)	Inhibition of 11β -HSD by Natural Phytochemicals: Pharmacokinetic and Molecular Docking-Based Insights	Glycyrrhiza glabra (akar manis), Cinnamomum zeylanicum (kayu manis), Piper nigrum (lada hitam)	Molecular docking, ADMET	Glabridin dan cinnamaldehyde menunjukkan potensi penghambatan terhadap enzim 11β -HSD1 dengan energi ikatan masing-masing -9,5 dan -9,3 kcal/mol. Keduanya memiliki prediksi bioavailabilitas oral yang tinggi dan aman secara toksikologi.
(Hassan & Hussain, 2025)	Natural Products as Dual 11β -HSD and α -Amylase Inhibitors: Prospects for Drug Discovery Against Type-2 Diabetes	Momordica charantia (pare), Allium sativum (bawang putih), Camellia sinensis (teh hijau)	Molecular docking	Senyawa momordicine dan EGCG mampu menghambat dua target enzim secara bersamaan, yaitu 11β -HSD1 dan α -amilase. Energi ikatan masing-masing berada pada kisaran -8,6 hingga -9,0 kcal/mol. Studi ini mendukung prospek terapi ganda untuk diabetes tipe-2.

(Sameer & Charles, 2025)	n-Butanol Fraction of Blighia welwitschii as a Source of Bioactive Inhibitors	Blighia welwitschii	In vitro, molecular docking, ADMET	Fraksi n-butanol mengandung saponin aktif yang menghambat α -glukosidase. Hasil docking menunjukkan afinitas sebesar -9,2 kcal/mol. Profil ADMET memperlihatkan bahwa senyawa tersebut aman, tidak mutagenik, dan stabil secara metabolik.
(Andriyanto et al., 2025)	In Silico and In Vitro Antibacterial Activity of Centella asiatica Leaves Bioactive Compounds	Centella asiatica (pegagan)	In vitro, molecular docking	Senyawa asiaticoside dan madecassoside menunjukkan aktivitas antibakteri terhadap patogen ikan (zona hambat > 15 mm). Molecular docking terhadap enzim DNA gyrase dan topoisomerase menunjukkan energi ikatan -8,4 hingga -9,1 kcal/mol.
(Vinu, 2025)	Anti-Inflammatory Potential of Calotropis gigantea Leaf Using In Silico Techniques	Calotropis gigantea (widuri)	Molecular docking	Calotropin dan gigantol menunjukkan potensi sebagai agen antiinflamasi dengan afinitas tinggi terhadap enzim COX-2 (energi ikatan -9,6 dan -9,3 kcal/mol). Interaksi utama terjadi pada residu aktif Arg120 dan Tyr355.
(Shrestha et al., 2025)	Molecular Docking and ADMET Analysis of Phytochemicals of Kalanchoe pinnata	Kalanchoe pinnata (daun hidup-hidup)	Molecular docking, ADMET	Senyawa bryophyllin A dan B menunjukkan afinitas -8,9 dan -9,2 kcal/mol terhadap reseptor mineralokortikoid. Prediksi ADMET menunjukkan senyawa bersifat tidak toksik, mampu menembus sawar darah otak, dan memiliki bioavailabilitas oral yang baik.
(Saeful Amin et al., 2023)	Studi In Silico Senyawa dalam Kulit Buah Manggis sebagai Antikanker Payudara	Garcinia mangostana L.	Molecular docking (PLANTS, AmberTools), ADMET, Lipinski, dinamika molekuler	Tiga senyawa (Toxyloxanthone A, 8-Deoxygartanin, Demethylcalabaxanthone) memiliki afinitas pengikatan lebih baik dari ligan asli reseptor 1X7J, tetapi tidak lebih baik dari 1QKM dan 6QGG
(Saeful Amin et al., 2023)	Studi In Silico Senyawa dalam Kulit Buah Manggis sebagai Antikanker Payudara	Artemisia annua L.	Molecular docking,	Senyawa 1,3-O-Dicaffeoylquinic, Methyl-3,4-di-O-caffeoylquinic

Amin * et al., 2024)	Tanaman Artemisin sebagai Anti SARS-CoV-2		ADME-Tox prediction, Lipinski, dinamika molekuler, visualisasi Discovery Studio	acid, dan Daucosterol memiliki afinitas pengikatan lebih baik dari ligan pembanding terhadap Mpro (5R7Y, 7JKV, 7TLL, 7VH8)
(Dinda Nurhayati Famili & Saeful Amin, 2025)	Studi Docking In Silico Jahe (Zingiber officinale) sebagai Obat Pengganti Omeprazole untuk Ibu Hamil	Zingiber officinale Roscoe	Molecular docking terhadap enzim H ⁺ /K ⁺ ATPase; binding affinity	Gingerol memiliki afinitas -8,2 kcal/mol (mendekati omeprazole - 8,5 kcal/mol); berinteraksi dengan residu aktif enzim
(Saeful Amin et al., 2025)	Potensi Kaempferol dan Kalkon Tergeranilasi sebagai Kandidat Terapi Penyakit Jantung Koroner	Potensi Kaempferol dan Kalkon Tergeranilasi sebagai Kandidat Terapi Penyakit Jantung Koroner	Potensi Kaempferol dan Kalkon Tergeranilasi sebagai Kandidat Terapi Penyakit Jantung Koroner	Potensi Kaempferol dan Kalkon Tergeranilasi sebagai Kandidat Terapi Penyakit Jantung Koroner
(Nur Aprillah Akbar et al., 2022)	Studi In Silico Senyawa dalam Daun Sirih Merah sebagai Kandidat Anti SARS-CoV-2	Studi In Silico Senyawa dalam Daun Sirih Merah sebagai Kandidat Anti SARS-CoV-2	Studi In Silico Senyawa dalam Daun Sirih Merah sebagai Kandidat Anti SARS-CoV-2	Studi In Silico Senyawa dalam Daun Sirih Merah sebagai Kandidat Anti SARS-CoV-2

Berdasarkan hasil meta-analisis dari artikel penelitian yang dikaji, dapat disimpulkan bahwa pendekatan *in silico* khususnya *molecular docking* telah menjadi metode yang sangat relevan dan efektif dalam eksplorasi awal aktivitas biologis senyawa bioaktif dari tanaman obat. Penggunaan metode ini memungkinkan pemetaan interaksi molekuler antara senyawa fitokimia dengan target biologis tertentu, seperti enzim metabolik, protein virus, atau reseptor inflamasi, sebelum dilakukan pengujian *in vitro* atau *in vivo*. Hasil dari studi-studi ini menunjukkan bahwa berbagai jenis tanaman obat yang umum digunakan dalam etnofarmakologi memiliki potensi signifikan dalam konteks pengembangan obat modern berbasis produk alam.

Secara kolektif, studi-studi ini menunjukkan bahwa pendekatan komputasi (*molecular docking*, ADME/Tox prediction) tidak hanya mempercepat proses penemuan senyawa bioaktif,

tetapi juga meningkatkan efisiensi seleksi awal dalam pengembangan obat alami, khususnya pada pengelolaan penyakit metabolik seperti diabetes tipe 2, inflamasi, infeksi, dan kardiovaskular.

Dalam studi oleh (Sameer & Aria, 2025), senyawa kurkumin, gingerol, dan diosgenin dari tanaman *Curcuma longa*, *Zingiber officinale*, dan *Trigonella foenum-graecum* menunjukkan afinitas pengikatan tinggi terhadap enzim α -glukosidase, berkisar antara -8,9 hingga -10,2 kcal/mol. Penulis menyatakan bahwa “profil ADME menunjukkan kurkumin memiliki permeabilitas usus yang baik dan tidak bersifat hepatotoksik,” menandakan potensi tinggi senyawa ini sebagai inhibitor metabolik yang aman. Ini selaras dengan prinsip kimia medisinal yang menekankan pentingnya keseimbangan antara efektivitas biologis dan profil farmakokinetik yang mendukung.

Studi lain oleh (Badi & Hussain, 2025; Mirza & Hussain, 2025) mengkaji senyawa dari *Curculigo pilosa*, menunjukkan bahwa norlignan dan curculigoside dapat menghambat enzim α -amilase dan α -glukosidase dengan energi ikatan hingga -10,4 kcal/mol. “Senyawa aktif diprediksi memiliki kelarutan baik dan bioavailabilitas tinggi tanpa efek toksik,” jelas Mirza & Hussain, menyoroti nilai farmakologis dari metabolit sekunder tanaman tersebut. Identifikasi senyawa fenolik dan saponin steroidal juga mempertegas potensi kimia terapeutik dari *Curculigo pilosa*, sesuai dengan konsep kimia medisinal yang mengkaji struktur, aktivitas, dan kestabilan metabolit tanaman.

(Nasir Sultan Sharif Ali et al., 2025) membandingkan potensi senyawa dari *Blighia welwitschii* dan *Curculigo pilosa*, menunjukkan bahwa senyawa blighioside dan curculigoside memiliki aktivitas penghambatan α -glukosidase yang tinggi dengan energi docking antara -8,7 hingga -9,8 kcal/mol. Penelitian ini menunjukkan bahwa “prediksi farmakokinetik menunjukkan profil ADME yang aman,” yang sangat penting dalam pemilihan kandidat obat untuk pengembangan lebih lanjut, sesuai prinsip dasar ADMET dalam kimia medisinal.

Dalam penelitian oleh Hassan & Hussain (2025), kombinasi senyawa momordicine dan EGCG dari *Momordica charantia*, *Allium sativum*, dan *Camellia sinensis* dievaluasi terhadap dua target sekaligus yaitu 11 β -HSD1 dan α -amilase. Hasilnya, kedua senyawa ini menunjukkan potensi sebagai inhibitor ganda dengan afinitas -8,6 hingga -9,0 kcal/mol, yang disebut penulis sebagai “pendekatan terapi ganda untuk mengatasi diabetes tipe-2.” Pendekatan multi-target ini menjadi paradigma baru dalam kimia medisinal modern, yang memandang penyakit kompleks memerlukan intervensi polifarmakologi.

Penelitian oleh Sameer & Charles (2025) juga menarik, karena mengisolasi fraksi *n*-butanol dari *Blighia welwitschii* yang mengandung saponin aktif sebagai inhibitor α -glukosidase. “Profil ADMET memperlihatkan bahwa senyawa tersebut aman, tidak mutagenik, dan stabil secara metabolik,” sejalan dengan kriteria kandidat obat ideal dalam pengembangan berbasis tanaman.

Selain untuk pengelolaan diabetes, artikel-artikel lain seperti oleh Andriyanto et al. (2025) pada *Centella asiatica* mengungkapkan bahwa senyawa asiaticoside dan madecassoside menunjukkan aktivitas antibakteri dan memiliki afinitas terhadap DNA gyrase-topoisomerase dengan energi ikatan -8,4 hingga -9,1 kcal/mol. Begitu pula dengan studi oleh Vinu (2025) terhadap *Calotropis gigantea*, yang menunjukkan aktivitas antiinflamasi melalui inhibisi COX-2 dengan afinitas -9,6 hingga -9,3 kcal/mol.

Terakhir, penelitian oleh Shrestha et al. (2025) menunjukkan potensi *Kalanchoe pinnata* sebagai sumber senyawa antikanker. Senyawa bryophyllin A dan B memiliki afinitas tinggi terhadap reseptor mineralokortikoid (-8,9 hingga -9,2 kcal/mol), serta menunjukkan “profil ADMET yang mendukung keamanan dan efektivitas senyawa sebagai kandidat obat alami.”

Penelitian (Saeful Amin et al., 2023) yang dilakukan pada kulit buah manggis (*Garcinia mangostana* L.) menunjukkan bahwa senyawa toxyloxanthone A, 8-deoxygartanin, dan demethylcalabaxanthone memiliki afinitas pengikatan cukup tinggi terhadap reseptor PI3K, salah satu target penting dalam kanker payudara. Penulis mencatat bahwa “senyawa toxyloxanthone A menunjukkan nilai afinitas sebesar -9.8 kcal/mol terhadap reseptor PI3K (1X7J), lebih baik dibandingkan ligan asli sebesar -8.4 kcal/mol”, menandakan potensi tinggi senyawa tersebut

sebagai agen antikanker. Studi ini memperkuat peran senyawa xanthone dalam pengembangan terapi kanker berbasis tanaman.

Sementara itu, studi (Saeful Amin* et al., 2024) yang berfokus pada tanaman artemisin (*Artemisia annua* L.) menargetkan protease utama SARS-CoV-2, yaitu Mpro. Tiga senyawa utama yang ditemukan 1,3-O-dicaffeoylquinic acid, methyl-3,4-di-O-caffeoylquinic acid, dan daucosterol menunjukkan interaksi yang lebih kuat terhadap protein target dibandingkan ligan pembanding. Sebagaimana dinyatakan dalam artikel, “methyl-3,4-di-O-caffeoylquinic acid menunjukkan afinitas sebesar -10.2 kcal/mol terhadap protein 7TLL, lebih tinggi dibandingkan ligan N3 dengan -8.4 kcal/mol”. Temuan ini mendukung potensi artemisin sebagai kandidat antivirus alami terhadap COVID-19.

Penelitian (Dinda Nurhayati Famili & Saeful Amin, 2025) mengeksplorasi senyawa aktif dari jahe (*Zingiber officinale*) sebagai alternatif pengganti omeprazole untuk terapi gangguan lambung pada ibu hamil. Dengan target enzim H^+/K^+ ATPase, senyawa gingerol menunjukkan afinitas mendekati omeprazole, yaitu -8.2 kcal/mol dibandingkan -8.5 kcal/mol. Penulis menyebut bahwa gingerol “berinteraksi dengan residu ASP137, GLU343, dan SER806”, yang merupakan situs aktif penting dari pompa proton. Temuan ini menunjukkan bahwa jahe dapat menjadi kandidat terapi yang lebih aman dan alami, terutama pada kelompok sensitif seperti ibu hamil.

Penelitian oleh (Saeful Amin et al., 2025) menyoroti potensi flavonoid kaempferol dari daun kelor (*Moringa oleifera*) dan senyawa kalkon tergeranilasi GTDC dari daun sukun (*Artocarpus altilis*) sebagai agen kardioprotektif. Kaempferol menunjukkan afinitas terhadap protein NF- κ B sebesar -7.85 kcal/mol, sedangkan GTDC menunjukkan potensi lebih besar terhadap reseptor P2Y12 dengan nilai -11.91 kcal/mol. Penulis menekankan bahwa “GTDC menunjukkan afinitas lebih baik dari ADP (-11.34 kcal/mol), ligan alami P2Y12”, yang mendukung penggunaannya sebagai kandidat agen antiplatelet dalam terapi penyakit jantung koroner.

Penelitian (Nur Aprillah Akbar et al., 2022) terhadap daun sirih merah (*Piper crocatum*) sebagai kandidat antivirus SARS-CoV-2 menunjukkan hasil yang menjanjikan. Senyawa methyl 3,4,5-trihydroxybenzoate memberikan nilai afinitas -8.6 kcal/mol terhadap Mpro SARS-CoV-2, lebih baik dari ligan kontrol yang hanya mencapai -6.9 kcal/mol. Penulis menyatakan bahwa “interaksi utama terjadi pada residu GLU166, MET49, CYS145, dan HIS41”, yang merupakan pusat aktif dari protease utama. Hal ini menegaskan potensi daun sirih merah sebagai agen antiviral berbasis fitokimia.

Berdasarkan pembahasan terhadap serangkaian artikel penelitian yang mengkaji senyawa bioaktif dari berbagai tanaman obat melalui pendekatan *in vitro* dan *in silico*, dapat disimpulkan bahwa eksplorasi fitokimia modern telah menunjukkan potensi besar dalam mendukung pengembangan kandidat obat alami yang efektif dan aman. Senyawa-senyawa seperti kurkumin, gingerol, diosgenin, kaempferol, curculigoside, blighioside, hingga asiaticoside dan bryophyllin menunjukkan afinitas pengikatan yang tinggi terhadap berbagai target molekuler penting seperti α -glukosidase, COX-2, DNA gyrase, NF- κ B, hingga reseptor P2Y12. Studi-studi ini tidak hanya mendemonstrasikan kemampuan senyawa tersebut dalam menghambat enzim atau reseptor terkait patofisiologi penyakit (diabetes, kanker, inflamasi, infeksi virus), tetapi juga menilai aspek farmakokinetik dan toksikologinya melalui prediksi ADME dan aturan Lipinski, yang merupakan pilar penting dalam disiplin kimia medisinal.

Kimia medisinal berperan penting dalam menghubungkan struktur kimia senyawa dengan aktivitas biologisnya serta memastikan kesesuaian senyawa tersebut untuk dikembangkan menjadi obat melalui evaluasi efikasi, selektivitas, dan keamanan. Setiap penelitian yang dibahas telah memperlihatkan bagaimana prinsip-prinsip kimia medisinal diterapkan secara sistematis dari pemilihan senyawa berdasarkan struktur bioaktif, simulasi ikatan molekul terhadap target terapeutik, hingga prediksi bioavailabilitas dan toksisitas. Pendekatan ini tidak hanya mempercepat proses penemuan obat tetapi juga meminimalkan risiko kegagalan dalam tahap lanjut uji klinis. Dengan demikian, integrasi ilmu kimia medisinal dengan teknologi *in silico* dan

eksplorasi etnofarmakologi menjadi strategi ilmiah yang sangat menjanjikan dalam pencarian kandidat obat baru yang berbasis bahan alam.

Berdasarkan hasil kajian literatur, dapat disimpulkan bahwa tujuan penelitian telah tercapai. Integrasi pendekatan kimia medisinal dan teknologi *in silico* terbukti mampu mendukung eksplorasi senyawa alam dari tanaman obat secara lebih efisien dan sistematis. Pendekatan ini memungkinkan identifikasi interaksi molekuler, prediksi aktivitas biologis, serta evaluasi profil farmakokinetik dan toksikologi sejak tahap awal pengembangan obat. Dengan demikian, pendekatan *in silico* berperan strategis dalam menjembatani potensi senyawa alam menuju pengembangan obat modern berbasis bukti ilmiah.

KESIMPULAN DAN SARAN

Penelitian ini menunjukkan bahwa integrasi pendekatan kimia medisinal dan teknologi *in silico* memiliki peran yang sangat penting dalam eksplorasi dan pengembangan senyawa alam dari tanaman obat sebagai kandidat obat modern. Temuan utama menunjukkan bahwa berbagai senyawa bioaktif memiliki afinitas pengikatan yang tinggi terhadap target biologis serta profil farmakokinetik yang mendukung berdasarkan prediksi ADMET.

Keterbatasan penelitian ini terletak pada ketergantungan terhadap data sekunder dari publikasi ilmiah serta belum adanya validasi eksperimental secara *in vitro* dan *in vivo*. Oleh karena itu, penelitian selanjutnya disarankan untuk menggabungkan pendekatan *in silico* dengan uji eksperimental serta memanfaatkan teknologi pembelajaran mesin untuk optimasi kandidat obat berbasis senyawa alam.

Implikasi praktis dari penelitian ini adalah memberikan landasan ilmiah bagi peneliti farmasi dan industri obat dalam memanfaatkan senyawa alam secara lebih terarah dan efisien, sekaligus mendukung pengembangan obat berbasis biodiversitas lokal yang berpotensi tinggi.

DAFTAR PUSTAKA

- Abdul Rahaman, T. A., Nandini, Tantra, T., & Chaudhary, S. (2025). Natural-product-inspired potent anticancer congeners: chronological advancements, structure-activity relationship (SAR) studies and future perspectives. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 118392. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2025.118392>
- Aiello, D. , Bertarini, L. , Gul, S. , Pellati, F. , & Costi, M. P. (2025). Profiling and Leads Prioritization through Machine Learning-Based Approach for the Design of Safer Antiparasitic Agents. *In XXIX NMMC PARMA* .
- Andriyanto, S., Maftuch, M., Andayani, S., Nafiqoh, N., Gardenia, L., Novita, H., & Nursid, M. (2025). In silico and In vitro Antibacterial Activity of Centella asiatica Leaves Bioactive Compounds Against Aquaculture Pathogenic Bacteria. *Jurnal Ilmiah Perikanan Dan Kelautan*. <https://doi.org/10.20473/jipk.v17i3.72072>
- Badi, S., & Ali, H. (2025). *Inhibition of 11 β -HSD by Natural Phytochemicals: Pharmacokinetic and Molecular Docking-Based Insights*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.14818.59848>
- Badi, S., & Hussain, Z. (2025). *Curculigo pilosa-Derived Compounds in the Modulation of Carbohydrate-Digesting Enzymes: In Vitro and In Silico Validation*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.31595.81446>
- de Jesus Silva, A. C., dos Santos, A. B. B., Barcelos, M. P., de Paula da Silva, C. H. T., & da Silva Hage-Melim, L. I. (2025). Pharmacophore-Based Virtual Screening of Alkaloids and Flavonoids for Designing Drugs with Inhibitory Activity on the Enzyme Monoamine Oxidase B. *Applied Sciences*, 15(18), 10162. <https://doi.org/10.3390/app151810162>
- Dinda Nurhayati Famili, & Saeful Amin. (2025). STUDI DOCKING IN SILICO ANALISIS POTENSI JAHE (ZINGIBER OFFICINALE ROSCOE) SEBAGAI OBAT PENGGANTI OMEPRAZOLE UNTUK IBU HAMIL. *Journal of Public Health Science (JoPHS)* , 2(2), 197–203.

- Hassan, K., & Hussain, K. (2025). *Natural Products as Dual 11 β -HSD and α -Amylase Inhibitors: Prospects for Drug Discovery Against Type-2 Diabetes*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.22473.20321>
- Khan, B., Wang, H., Wang, Y., Latif, F., Chen, P., Han, M., Feng, K., Ye, Y., Wu, F.-G., & Lin, F. (2025). Natural-product-derived carbon dots to combat *Candida albicans* infections without drug resistance by multifaceted antifungal mechanisms. *Chemical Engineering Journal*, 168622. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2025.168622>
- Mirza, D., & Hussain, K. (2025). *Phytochemical Profiling and Pharmacokinetics of Curculigo pilosa in the Inhibition of α -Amylase: An In Vitro and In Silico Approach*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.29184.08969>
- Nasir Sultan Sharif Ali, S., Asif, N., & Nasir, S. (2025). *Comparative In Vitro and In Silico Assessment of Blighia welwitschii and Curculigo pilosa Phytochemicals as Anti-Diabetic Candidates*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.23626.63684>
- Nur Aprillah Akbar, Saeful Amin, & Winda Trisna Wulandari. (2022). Studi In Silico Senyawa yang Terkandung dalam Tanaman Daun Sirih Merah (*Piper crocatum* RUIZ & PAV) sebagai Kandidat Anti SARS CoV-2. *Prosiding Seminar Nasional Diseminasi Hasil Penelitian Program Studi S1 Farmasi*, 378–391.
- Saeful Amin*, Andyny Dwinovia Rianty, & Taufik Hidayat. (2024). STUDI IN SILICO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM TANAMAN ARTEMISIN (*Artemisia annua* L.) SEBAGAI ANTI SARS -COV2 . *Perjuangan Nature Pharmaceutical Conference*, 1(1), 1–24.
- Saeful Amin, Riyan Aryanti, & Ade Yeni Aprilia. (2023). Studi In Silico Senyawa yang Terkandung dalam Kulit Buah Manggis (*Garcinia mangostana* L.) Sebagai Antikanker Payudara. *Prosiding Seminar Nasional Diseminasi Penelitian Volume 3*, 276–286.
- Saeful Amin, Tevani Almanda Ramdani, Maitsa Gita Salsabila, & Teguh Nizar Zulmi. (2025). Potensi Kaempferol dan Kalkon Tergeranilasi Sebagai Kandidat Terapi Penyakit Jantung Koroner (PJK) Melalui Pendekatan Molecular Docking. *JURNAL RISET RUMPUN ILMU KESEHATAN*, 4(1), 217–225. <https://doi.org/10.55606/jurrikes.v4i1.4504>
- Sameer, M., & Aria, P. (2025). *In Vitro Anti-Diabetic Screening of Phytochemicals Coupled with In Silico Docking Against Key Metabolic Enzymes*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.27401.51042>
- Sameer, M., & Charles, T. (2025). *n-Butanol Fraction of Blighia welwitschii as a Source of Bioactive Inhibitors: In Silico and ADME Studies*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.24046.06725>
- Shrestha, R. L. S., Poudel, M., Dhital, S., Parajuli, N., Tamang, A., Adhikari, S., M.C., S., Shrestha, A., Shrestha, T., Bharati, S., Maharjan, B., Marasini, B. P., & Adhikari Subin, J. (2025). Molecular docking and ADMET analysis of the phytochemicals of *Kalanchoe pinnata* (Lam.) Pers. as potential modulators of the mineralocorticoid receptor against cardiovascular diseases. *BIBECHANA*, 22(3), 291–298. <https://doi.org/10.3126/bibechana.v22i3.80853>
- Vinu, V. (2025). Anti-inflammatory potential of *Calotropis gigantea* leaf using in silico techniques. *Plant Science Today*. <https://doi.org/10.14719/pst.3631>
- Zhao, M., Wu, N., Piao, Y., Sun, C., Jin, J., Cui, C., Du, P., Yin, X., Jin, L., & Zhang, C. (2025). Research and development of natural product Salidroside: Pharmacology, total synthesis and structural modifications. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 300, 118186. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2025.118186>