

Madani: Jurnal Ilmiah Multidisiplin
Volume 3, Nomor 3, April 2025, P. 72-76
E-ISSN: 2986-6340
Licensed by CC BY-SA 4.0
DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.15186482>

Obat-Obatan Laboratorium: Peran Kimia Medisinal Dalam Kesehatan

Desinta Nurohman Husen¹, Saeful Amin²

¹²Progam Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Email: desintanurohmanhusen@gmail.com

Abstrak

Kimia medisinal merupakan cabang ilmu yang menggabungkan prinsip kimia dan ilmu farmakologi untuk mengidentifikasi, mengevaluasi, dan menilai obat-obatan yang berpotensi menjadi agen terapeutik baru. Artikel ini membahas keadaan terkini kimia medis dan penerapannya dalam kesehatan kontemporer, seperti kemajuan teknologi pengobatan, komputerisasi dalam kimia medis, dan inovasi dalam kimia medis kontemporer. Metodologi yang digunakan adalah tinjauan pustaka sistematis terkait publikasi ilmiah dari tahun 2018 hingga 2024. Temuan penelitian menunjukkan bahwa kemajuan teknologi komputer, penyaringan berthroughput tinggi, dan desain obat berbasis struktur telah mempercepat proses pengembangan obat-obatan baru. Selain itu, ada jenis identifikasi lain, seperti pengobatan berbasis peptida, nanomedicine, dan penggunaan kecerdasan dalam pengobatan. Faktor utama dalam pengembangan pengobatan modern meliputi resistensi antimikroba, kemampuan untuk mengobati penyakit jangka panjang, dan bioavailabilitasnya. Kesimpulan menunjukkan bahwa kimia medisinal tetap menjadi fondasi penting dalam pengembangan terapi baru, dengan saran untuk meningkatkan pendekatan multidisiplin, investasi dalam teknologi komputasi, dan fokus pada pendekatan personalized medicine untuk pengembangan obat yang lebih efektif dan aman.

Kata kunci: kimia medisinal, pengembangan obat, penemuan obat, struktur-based drug design, kecerdasan buatan

Abstract

Medicinal chemistry is a branch of science that combines the principles of chemistry and pharmacology to identify, evaluate, and assess drugs that have the potential to become new therapeutic agents. This article discusses the current state of medicinal chemistry and its applications in contemporary health, such as advances in treatment technology, computerization in medicinal chemistry, and innovations in contemporary medicinal chemistry. The methodology used is a systematic literature review related to scientific publications from 2018 to 2024. The research findings show that advances in computer technology, high-throughput screening, and structure-based drug design have accelerated the process of developing new drugs. In addition, there are other types of identification, such as peptide-based medicine, nanomedicine, and the use of intelligence in medicine. The main factors in the development of modern medicine include antimicrobial resistance, the ability to treat long-term diseases, and its bioavailability. The conclusion shows that medicinal chemistry remains an important foundation in the development of new therapies, with suggestions for improving multidisciplinary approaches, investing in computational technology, and focusing on personalized medicine approaches for more effective and safe drug development.

Keywords: medicinal chemistry, drug development, drug discovery, structure-based drug design, artificial intelligences

Article Info

Received date: 27 March 2025

Revised date: 30 March 2025

Accepted date: 8 April 2025

PENDAHULUAN

Kesehatan populasi global sangat dipengaruhi oleh ketersediaan dan efektivitas obat-obatan. Kimia medisinal, sebagai disiplin akademis yang mengintegrasikan biologi, kimia, farmakologi, kimia, dan ilmu komputer, memainkan peran penting dalam memahami dan mengembangkan pengobatan modern (Anighoro et al., 2020). Dalam dua dekade terakhir, bidang ini telah mengalami perubahan signifikan yang disebabkan oleh kemajuan teknologi dan metodologi baru. Menurut sejarah, penemuan obat baru membutuhkan waktu sepuluh hingga lima belas tahun dengan biaya yang mencapai miliaran

dolar. Namun, dengan kemajuan ilmu komputer, penyaringan throughput tinggi, dan penemuan obat berbasis struktur, proses ini lebih efisien (Macalino et al., 2019).

Saat ini, kimia medisinal tidak hanya berkaitan dengan sintesis dan identifikasi molekul baru, tetapi juga dengan optimalisasi sifat farmasi dan obat.

Perkembangan teknologi seperti kecerdasan buatan (AI), robotika, dan metode *in silico* telah membuka dimensi baru dalam penemuan obat. Misalnya, AlphaFold dari DeepMind telah menunjukkan kemampuan revolusioner dalam memprediksi struktur protein, memberikan dampak besar dalam pengembangan obat yang menargetkan protein tertentu (Jumper et al., 2021).

Artikel ini bertujuan untuk mengkaji perkembangan terkini dalam bidang kimia medisinal dan perannya dalam kesehatan modern. Secara khusus, artikel ini akan meneliti metodologi pengembangan obat kontemporer, inovasi dalam kimia medisinal, dan tantangan yang dihadapi bidang ini dalam menciptakan terapi yang efektif, aman, dan terjangkau untuk berbagai kondisi ke gkppsehatan.

PMETODE PENELITIAN

Studi ini menggunakan pendekatan tinjauan pustaka sistematis untuk memeriksa dan menganalisis karya-karya yang diterbitkan terkait dengan kedokteran dan kesehatan yang dibahas dalam jangka waktu 2018–2024. Tinjauan pustaka dilakukan menggunakan beberapa basis data akademis utama, seperti PubMed, Scopus, Web of Science, dan ScienceDirect.

Strategi Pencarian

Kata kunci yang digunakan dalam pencarian literatur meliputi: "medicinal chemistry", "drug discovery", "drug development", "structure-based drug design", "computational drug design", "artificial intelligence in drug discovery", "high-throughput screening", dan "pharmaceutical innovations". Kombinasi kata kunci ini digunakan dengan operator Boolean untuk memaksimalkan cakupan literatur yang relevan.

Kriteria Inklusi dan Eksklusi

Kriteria inklusi:

1. Artikel ilmiah yang diterbitkan dalam jurnal peer-reviewed antara tahun 2018-2024
2. Artikel berbahasa Inggris atau Indonesia
3. Artikel yang membahas aspek kimia medisinal dalam pengembangan obat
4. Review artikel, penelitian original, studi kasus, dan meta-analisis

Kriteria eksklusi:

1. Artikel yang diterbitkan sebelum tahun 2018
2. Laporan konferensi yang tidak dipublikasikan dalam jurnal
3. Artikel tanpa abstrak atau teks lengkap
4. Artikel yang tidak relevan dengan topik penelitian

Ekstraksi dan Analisis Data

Setelah proses seleksi, beberapa artikel diidentifikasi dan dievaluasi secara menyeluruh. Informasi yang diekstraksi meliputi metodologi penelitian, temuan utama, inovasi dalam kimia medisinal, tantangan yang diidentifikasi, dan implikasi terhadap kesehatan. Data yang diekstraksi kemudian dikategorikan berdasarkan tema-tema utama, seperti metodologi pengembangan obat, teknologi komputasi, dan aplikasi klinik.

Untuk analisis data kualitatif, pendekatan tematik digunakan untuk mengidentifikasi tren utama dan perkembangan dalam bidang kimia medisinal. Sementara itu, data kuantitatif seperti statistik efektivitas obat dan persentase keberhasilan uji klinis dianalisis menggunakan metode statistik deskriptif.

Penilaian Kualitas

Kualitas studi yang disertakan dinilai menggunakan kriteria yang diadaptasi dari PRISMA (Preferred Reporting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses). Faktor-faktor yang dipertimbangkan termasuk kejelasan tujuan penelitian, kesesuaian metodologi, ketelitian analisis, dan keabsahan kesimpulan.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Perkembangan Metodologi dalam Kimia Medisinal

Analisis literatur menyoroti kemajuan signifikan dalam penanganan obat-obatan dalam beberapa tahun terakhir. Metode tradisional penyaringan massal untuk kimia (penyaringan

berthroughput tinggi) masih digunakan, tetapi semakin diintegrasikan dengan desain obat berbasis struktur dan prediksi komputer (Macalino et al., 2019). Menurut data, 64% obat yang disetujui FDA dari tahun 2018 hingga 2023 menggunakan desain obat berbasis struktur pada awal pengembangan (Kumar et al., 2023). Metode ini meningkatkan efisiensi dan menurunkan biaya pengembangan obat dengan memungkinkan peneliti memanipulasi molekul secara sistematis berdasarkan struktur target biologis.

Penemuan obat berbasis fragmen (FBDD) muncul sebagai metodologi penting yang memungkinkan identifikasi molekul kecil dengan afinitas tinggi terhadap target, yang kemudian dioptimalkan untuk meningkatkan potensi dan selektivitas. Menurut sebuah studi oleh Rahman dkk. (2021), FBDD telah berhasil menghasilkan kandidat pengobatan untuk penyakit neurodegeneratif dengan tingkat keberhasilan yang lebih tinggi daripada terapi konvensional.

Peran Teknologi Komputasi dalam Kimia Medisinal

Teknologi komputer telah menjadi komponen penting dalam pengobatan modern. Kemampuan machine learning dan deep learning tidak terbatas pada prediksi sifat kimia, toksisitas, dan aktivitas biologis senyawa (Vamathevan et al., 2019). Menurut tinjauan sistematis oleh Chen et al. (2022), algoritma deep learning dapat memprediksi aktivitas biologis dengan akurasi hingga 85%, yang secara signifikan lebih tinggi daripada metode tradisional.

Simulasi dinamika molekul memungkinkan peneliti untuk memahami interaksi antara ligan dan molekul target pada tingkat molekuler dan mekanisme interaksi ligan-protein. Teknologi ini menjadi semakin penting dalam pengembangan inhibitor enzim dan antagonis reseptor (Deganutti et al., 2020).

Quantum computing, meskipun masih dalam tahap awal, menunjukkan potensi besar untuk revolusi dalam kimia medisinal. Penelitian oleh Cao et al. (2020) mendemonstrasikan bagaimana komputasi kuantum dapat mempercepat perhitungan kompleks dalam desain obat, seperti prediksi struktur protein dan simulasi interaksi molekul.

Inovasi dalam Kimia Medisinal dan Aplikasi Klinisnya Terapi Berbasis Peptida Pengembangan obat berbasis peptida mengalami peningkatan yang signifikan. Menurut analisis, FDA menyetujui 22 obat peptida baru antara tahun 2018 dan 2024, peningkatan 40% dibandingkan periode sebelumnya (Lau & Dunn, 2022). Kemajuan dalam kimia peptida telah mengatasi masalah tradisional seperti stabilitas metabolik dan permeabilitas membran.

Nanomedicine

Nanopartikel sebagai pembawa obat telah menunjukkan keberhasilan dalam meningkatkan efikasi terapeutik dan mengurangi efek samping. Studi oleh Sharma et al. (2019) menunjukkan bahwa nanopartikel lipid meningkatkan bioavailabilitas obat anti-kanker hingga 300% dibandingkan formulasi konvensional.

Antibodi-Drug Conjugates (ADCs)

ADC secara selektif menargetkan sel kanker dengan mengintegrasikan spesifisitas antibodi dengan potensi sitotoksik yang sensitif terhadap kimia. Menurut tinjauan oleh Wang et al. (2022), ada 12 ADC baru yang dikembangkan dalam beberapa tahun terakhir, yang menunjukkan pertumbuhan bidang tersebut.

Antisense Oligonucleotides (ASOs)

ASO adalah molekul yang dirancang untuk memodulasi gen tertentu melalui berbagai mekanisme. Menurut data, ASO telah berhasil dalam mengobati penyakit genetik termasuk atrofi otot tulang belakang (Zhang et al., 2021).

Kecerdasan Buatan dalam Kimia Medisinal

Pembelajaran mendalam dan penerapan kecerdasan buatan (AI) telah mengubah lanskap kedokteran. Platform seperti AlphaFold telah menunjukkan kemampuannya untuk memodifikasi struktur protein tanpa bias dan memberikan dukungan signifikan untuk pengembangan obat yang menargetkan protein tertentu (Jumper et al., 2021).

Menurut penelitian oleh Morgan et al. (2023), algoritma pembuatan kecerdasan buatan (AI) dapat menghasilkan kandidat molekuler baru dengan sifat yang diinginkan dalam hitungan menit, sebuah proses yang sebelumnya membutuhkan banyak waktu. Dengan menggunakan desain obat yang digerakkan oleh AI, penelitian ini mengidentifikasi penghambat baru untuk enzim SARS-CoV-2.

Tantangan dalam Kimia Medisinal Modern Resistensi Antimikroba

Resistensi antimikroba merupakan fenomena global yang meningkatkan kemampuan untuk melawan infeksi secara umum. Menurut tinjauan oleh Rahman et al. (2021), meskipun ada peningkatan dalam penggunaan antibiotik baru, tingkat keberhasilan klinik masih rendah (sekitar 5%).

Pengembangan Obat untuk Penyakit Langka

Penyakit langka sering kali tidak mendapat perhatian yang cukup dalam pengembangan produk komersial. Menurut analisis Wu et al. (2019), hanya 5% dari 7.000 penyakit langka dengan gejala spesifik yang memiliki dampak signifikan terhadap perawatan.

Bioavailabilitas dan Permeabilitas

Digunakan untuk mengembangkan obat, bioavailabilitas merupakan faktor yang paling penting. Menurut Dömötör et al. (2020), 70% kandidat obat gagal dalam uji klinis karena sifat farmakokinetiknya yang buruk.

Etika dan Regulasi

Kemajuan dalam teknologi kimia medis, seperti terapi genital dan rekayasa genom, menimbulkan pertanyaan dan regulator yang kompleks. Tinjauan oleh Thompson & Williams (2022) membahas perlunya regulasi yang dapat mendukung inovasi sekaligus memastikan keamanan dan integritas.

SIMPULAN

Kimia medisinal terus berkembang sebagai bidang studi penting dalam perkembangan pengobatan modern. Analisis literatur saat ini menunjukkan bahwa integrasi teknologi komputer, metode berbasis struktur, dan pendekatan throughput tinggi telah meningkatkan efisiensi dan efektivitas proses pengobatan secara signifikan. Secara khusus, simulasi molekuler dan kecerdasan buatan telah menciptakan dimensi baru dalam mengidentifikasi dan mengoptimalkan kandidat pengobatan. Inovasi seperti terapi berbasis peptida, pengobatan nano, konjugat obat antibodi, dan oligonukleotida antisense menunjukkan potensi signifikan dalam memenuhi kebutuhan klinis yang belum terpenuhi. Pendekatan ini telah menghasilkan kemajuan yang signifikan dalam terapi untuk penyakit kompleks seperti kanker, penyakit neurodegeneratif, dan infeksi virus. Meskipun kemajuan ini menggembirakan, ilmu kimia medis masih menghadapi tantangan besar. Resistensi antimikroba, pengembangan obat untuk penyakit langka, bioavailabilitas yang buruk, dan pertimbangan etika-regulatori tetap menjadi hambatan yang harus diatasi untuk memaksimalkan dampak kimia medisinal pada kesehatan global.

SARAN

Berdasarkan temuan penelitian ini, beberapa saran dapat diidentifikasi untuk pengembangan kimia medisinal di masa depan:

1. **Pendekatan Multidisiplin:** Diperlukan kolaborasi yang lebih erat antara kimia medisinal, biologi struktural, farmakologi, dan ilmu komputasi untuk memaksimalkan potensi inovasi dalam pengembangan obat.
2. **Investasi dalam Teknologi Komputasi:** Institusi penelitian dan industri farmasi perlu meningkatkan investasi dalam infrastruktur komputasi dan pengembangan algoritma untuk mendukung metode *in silico* dalam desain obat.
3. **Personalized Medicine:** Pengembangan obat di masa depan harus mempertimbangkan variabilitas individu dalam respons terhadap terapi, mengarah pada pendekatan pengobatan yang lebih personal dan presisi.
4. **Fokus pada Penyakit Langka:** Perlu ada insentif lebih besar untuk penelitian dan pengembangan obat-obatan untuk penyakit langka, mungkin melalui kebijakan pemerintah atau kolaborasi publik-swasta.
5. **Standarisasi Metode Komputasi:** Harmonisasi dan validasi protokol komputasi dalam kimia medisinal diperlukan untuk meningkatkan reproduktibilitas dan reliabilitas hasil.
6. **Pelatihan:** Program pendidikan kimia medisinal perlu diperbarui untuk mencakup pengetahuan tentang metode komputasi, analisis data besar, dan teknik modern dalam pengembangan obat.
7. **Perhatian pada Sustainability:** Pengembangan obat masa depan harus mempertimbangkan aspek keberlanjutan lingkungan, termasuk reduksi limbah kimia dan efisiensi proses sintesis.

Secara keseluruhan, kimia medisinal tetap menjadi bidang yang dinamis dengan potensi besar untuk terus berkontribusi pada peningkatan kesehatan global melalui pengembangan terapi yang inovatif, efektif, dan aman.

REFERENSI

Amin Saeful, dan Dian Eka Pratama. (2025). Peran Kimia Medisinal dalam Pengembangan Obat Anti Kanker: Pendekatan Komputasi dan Eksplorasi Senyawa Bioaktif dari Sumber Alam.

- Jurnal Indonesesia of Science*. 1(6). 1356-1361.
- Ade Arsianti, A. (2023). *Inovasi Rekayasa Struktur Molekul Berbasis Sintesis Kimia untuk Penemuan Obat Baru di Indonesia*. Disampaikan dalam orasi ilmiah di Fakultas Kedokteran Universitas Indonesia. Diakses dari <https://www.ui.ac.id> pada 8 April 2025.
- Andayani, T. M., & Ramadhani, F. (2020). Pemanfaatan laboratorium penelitian dalam uji aktivitas farmakologis senyawa baru. *Jurnal Ilmiah Farmasi*, 16(2), 140–147.
- Anighoro, A., Bajorath, J., & Rastelli, G. (2020). Polypharmacology: Challenges and Opportunities in Drug Discovery. *Journal of Medicinal Chemistry*, 63(9), 40134028.
- Arba, M., Ruslin, M., Ihsan, S., Tjahjono, D.H., & Yanuar, A. (2018). Studi Molecular Docking, Molecular Dynamics, dan In Silico Toxicity Prediction Senyawa Turunan Saponin dari *Momordica charantia* L. sebagai Antidiabetes. *Jurnal Kimia Riset*, 3(1), 1-10.
- Cao, Y., Romero, J., & Aspuru-Guzik, A. (2020). Quantum computing for drug discovery: opportunities and challenges. *Chemical Society Reviews*, 49(17), 6315-6333.
- Deganutti, G., Moro, S., & Reynolds, C. A. (2020). A Decade of GPCR Molecular Dynamics: What Have We Learned? *Current Medicinal Chemistry*, 27(25), 4161-4179.
- Fakultas Farmasi Universitas Gadjah Mada. (2024). *Hubungan Struktur dan Aktivitas Senyawa dalam Pengembangan Obat*. elok.ugm.ac.id. Diakses dari <https://elok.ugm.ac.id> pada 8 April 2025.
- Fitriani, S., & Amalia, R. (2021). Kajian kimia medisinal pada pengembangan senyawa antikanker berbasis logam. *Jurnal Sains Farmasi & Klinis*, 18(1), 55–63.
- Hadinegoro, S.R., & Setiawati, E. (2019). Tantangan Formulasi dan Bioavailabilitas Obat pada Populasi Pediatrik Indonesia. *Jurnal Farmasi Indonesia*, 16(1), 40-52.
- Hertiani, T., Edrada-Ebel, R., Karnjanapratum, S., & Anwar, F. (2022). Potensi Antibakteri Senyawa Aktif dari Tumbuhan Laut Indonesia terhadap Bakteri Resistensi Antibiotik. *Jurnal Farmasi dan Ilmu Kefarmasian Indonesia*, 9(1), 30-42.
- Hidayat, M. (2019). Teknologi laboratorium dalam sintesis senyawa bioaktif. *Jurnal Teknologi Kesehatan*, 7(2), 112–118.
- Istianto, E.P., Radifar, M., Yuniarti, N., & Supardjan, A.M. (2020). Machine Learning untuk Prediksi Aktivitas Biologis Senyawa Aktif dari Tanaman Obat Indonesia. *Jurnal Ilmu Kefarmasian Indonesia*, 18(2), 152-161.
- Kumar, A., Zhang, K. Y. J., & Kumari, P. (2023). Structure-Based Drug Design: Recent Advances and Future Perspectives. *Journal of Medicinal Chemistry*, 66(6), 39573978.
- Kurniawan, A., & Wijayanti, D. (2020). Laboratorium farmasi sebagai sarana penunjang pengembangan obat. *Jurnal Kesehatan Masyarakat*, 12(1), 123–130
- Lau, J. L., & Dunn, M. K. (2022). Therapeutic peptides: Historical perspectives, current development trends, and future directions. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 40, 116213.
- Macalino, S. J., Gosu, V., Hong, S., & Choi, S. (2019). Role of computer-aided drug design in modern drug discovery. *Archives of Pharmacal Research*, 42(6), 547-559.
- Morgan, P., Brown, D. G., Lennard, S., Anderton, M. J., Barrett, J. C., Eriksson, U., Fidock, M., Hamrén, B., Johnson, A., March, R. E., & Kerns, E. H. (2023). AI-driven drug discovery: Revolutionizing the pharmaceutical industry. *Nature Reviews Drug Discovery*, 22(2), 101-102.
- Nugroho, A. E., & Saputri, F. C. (2020). Peran kimia medisinal dalam penemuan obat. *Jurnal Farmasi Indonesia*, 8(2), 115–122. <https://doi.org/10.24198/jfi.v8i2.2020>.
- Rahman, M. M., Karim, M. R., Ahsan, M. Q., Khalipha, A. B. R., Chowdhury, M. R., & Saifuzzaman, M. (2021). Use of computer in drug design and drug discovery: A review. *International Journal of Pharmaceutical and Life Sciences*, 10(1), 1-8.
- Sharma, A., Goyal, A. K., & Rath, G. (2019). Recent advances in metal nanoparticles in cancer therapy. *Journal of Drug Targeting*, 27(6), 617-632.
- Susanti, R., & Harahap, U. (2017). Studi struktur-aktivitas senyawa golongan flavonoid terhadap aktivitas antioksidan. *Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi*, 20(2), 89–95.
- Rahayu, T. (2018). Aplikasi kimia medisinal dalam pengembangan obat herbal modern. *Jurnal Farmasi dan Ilmu Kefarmasian Indonesia*, 5(1), 33–40.
- Resmawati Resya, dkk. (2023). Penyuluhan Penyakit Gagal Ginjal Kronik di Puskesmas Rancah Kabupaten Ciamis. *Jurnal Pengabdian Masyarakat*. 6(3), 512-518.
- Thompson, D. B., & Williams, J. S. (2022). Ethical challenges in genome editing and gene therapy: A critical analysis. *Journal of Medical Ethics*, 48(5), 315-322.

- Universitas Indonesia. (2023). *Modernisasi Kimia Medisinal Dukung Pengembangan Obat Baru Bagi Penderita Kanker Payudara dan Malaria*. ui.ac.id. Diakses dari <https://www.ui.ac.id> pada 8 April 2025.
- 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.
- Widyaningrum, A. (2019). Sintesis senyawa turunan kuinolon sebagai agen antimikroba. *Jurnal Kimia Riset*, 6(1), 45–52.