



## **PERAN KIMIA MEDISINAL DALAM PENGEMBANGAN OBAT ANTIKANKER: KAJIAN LITERATUR TENTANG SENYAWA BIOAKTIF DARI SUMBER ALAM**

**Saeful Amin<sup>1</sup>, Resi Aulia Azhari<sup>2</sup>, Fauzia Rifany Nurmaliya<sup>3\*</sup>, Lexsa Pujawati<sup>4</sup>, Siti Hamidah<sup>5</sup>, M Luthfi Sopiyurrohman<sup>6</sup>**

<sup>1,2,3,4,5,6</sup> Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada  
fauziarifany2@gmail.com

### **Abstrak**

Kanker merupakan penyebab kematian utama di seluruh dunia dan menjadi tantangan besar dalam dunia kesehatan global. Terapi konvensional seperti kemoterapi dan radioterapi memiliki banyak keterbatasan, terutama dalam hal selektivitas dan efek samping (Putranto, 2022). Amin et al. (2025) menyatakan bahwa pengembangan terapi kanker yang lebih spesifik dan efektif sangat diperlukan. Tujuan untuk mengkaji kontribusi kimia medisinal dalam desain dan pengembangan senyawa alami sebagai kandidat obat antikanker. Kimia medisinal berperan penting dalam optimalisasi senyawa bioaktif melalui pendekatan struktur-aktivitas dan teknik komputasi seperti QSAR dan molecular docking. Tanaman lokal Indonesia diketahui memiliki kandungan metabolit sekunder seperti flavonoid, alkaloid, dan fenolik yang menunjukkan potensi sebagai agen antikanker. Hasil beberapa senyawa seperti strychnine N-oxide, squalene, dan xanton telah terbukti secara *in silico* dan *in vitro* memiliki afinitas tinggi terhadap target kanker. Studi ini menekankan pentingnya pendekatan multidisiplin dalam pengembangan terapi kanker yang lebih efektif dan aman berbasis sumber alam..

**Kata Kunci:** *In silico*, Kulit buah manggis, Senyawa xanton.

### **Abstract**

*Cancer is a leading cause of death worldwide and is a major challenge in global health. Conventional therapies such as chemotherapy and radiotherapy have many limitations, especially in terms of selectivity and side effects (Putranto, 2022). Amin et al. (2025) stated that the development of more specific and effective cancer therapies is urgently needed. The aim is to examine the contribution of medicinal chemistry in the design and development of natural compounds as anticancer drug candidates. Medicinal chemistry plays an important role in optimizing bioactive compounds through structure-activity approaches and computational techniques such as QSAR and molecular docking. Local Indonesian plants are known to contain secondary metabolites such as flavonoids, alkaloids, and phenolics which show potential as anticancer agents. The results of several compounds such as strychnine N-oxide, squalene, and xanthone have been shown in silico and in vitro to have high affinity for cancer targets. This study emphasizes the importance of a multidisciplinary approach in developing more effective and safe cancer therapies based on natural sources*

**Keywords:** *In silico*, Mangosteen peel, Xanthone compounds

@Jurnal Ners Prodi Sarjana Keperawatan & Profesi Ners FIK UP 2025

\* Corresponding author : Resi Aulia Azhari

Address : Jl. Letjen Mashudi No.20, Setiaratu, Kec. Cibeureum, Kab. Tasikmalaya, Jawa Barat 46196

Email :fauziarifany2@gmail.com

Phone : 082315045675

## PENDAHULUAN

Kanker merupakan penyebab kematian utama di seluruh dunia dan menjadi tantangan besar dalam dunia kesehatan global. Terapi konvensional seperti kemoterapi dan radioterapi memiliki banyak keterbatasan, terutama dalam hal selektivitas dan efek samping (Putranto, 2022). Amin et al. (2025) menyatakan bahwa pengembangan terapi kanker yang lebih spesifik dan efektif sangat diperlukan. Oleh karena itu, pendekatan berbasis kimia medisinal menjadi solusi penting dalam penemuan obat baru. Penelitian ini fokus pada strategi desain senyawa antikanker berbasis sumber alam.

Kimia medisinal merupakan cabang ilmu kimia yang mempelajari hubungan antara struktur kimia dan aktivitas biologis suatu senyawa. Menurut Syarifah et al. (2025), pendekatan ini memungkinkan pengembangan senyawa bioaktif yang lebih selektif dan minim efek samping. Teknik-teknik seperti QSAR, SAR, dan molecular docking digunakan untuk memodelkan interaksi senyawa dengan target biologis. Dhamayanti et al. (2025) menambahkan bahwa hal ini dapat mempercepat proses penemuan obat dari tanaman obat. Oleh karena itu, integrasi pendekatan kimia medisinal dan sumber alam sangat menjanjikan.

Metabolit sekunder dari tanaman seperti alkaloid, flavonoid, dan fenolik telah terbukti memiliki potensi sebagai antikanker. Syarifah et al. (2025) menjelaskan bahwa senyawa ini bekerja melalui mekanisme apoptosis, penghambatan proliferasi, dan inhibisi jalur sinyal kanker. Contohnya, flavonoid diketahui dapat menghambat enzim tirosin kinase yang berperan dalam pertumbuhan sel kanker. Tanaman seperti bajakah, manggis, dan bilimbi merupakan contoh sumber senyawa aktif tersebut. Penelitian-penelitian ini memperkuat pentingnya eksplorasi tanaman lokal Indonesia (Wahyuni, 2024).

Dalam studi yang dilakukan oleh Dhamayanti et al. (2025), ditemukan bahwa senyawa strychnine N-oxide memiliki IC<sub>50</sub> yang sangat rendah, menandakan efektivitas tinggi sebagai agen antikanker. Senyawa ini diisolasi dari *Strychnos lucida*, tanaman lokal yang belum banyak dieksplorasi. Selain itu, squalene dari *Averrhoa bilimbi* juga menunjukkan afinitas sangat tinggi terhadap protein target kanker. Dengan menggunakan pendekatan docking dan QSAR, efektivitas senyawa tersebut dapat diprediksi secara akurat. Ini menunjukkan bahwa senyawa lokal Indonesia memiliki prospek besar dalam terapi kanker.

Tasya Agustina et al. (2025) melakukan skrining fitokimia terhadap batang bajakah asal Bangka Belitung dan menemukan kandungan alkaloid, flavonoid, dan fenol. Senyawa ini memiliki aktivitas antioksidan dan potensi sebagai antikanker payudara. Penelitian ini penting untuk menguatkan penggunaan obat herbal tradisional

berbasis ilmiah. Bajakah telah lama digunakan oleh masyarakat adat, namun belum banyak dikaji secara ilmiah. Ini menunjukkan pentingnya integrasi pengetahuan lokal dengan pendekatan modern.

Jurnal JURRIKES (2025) menambahkan bahwa pendekatan komputasi dalam kimia medisinal dapat membantu mendesain senyawa antikanker dengan efisiensi tinggi. Jalur sinyal molekuler seperti PI3K/Akt, MAPK, dan Wnt/β-catenin menjadi target utama dalam desain terapi. Dengan menganalisis interaksi ligand-target, peneliti dapat meningkatkan selektivitas obat terhadap sel kanker. Senyawa seperti xanton dari *Garcinia mangostana* menunjukkan aktivitas signifikan melalui jalur tersebut (Amin, 2025). Oleh karena itu, pendekatan ini memperkuat dasar ilmiah dalam terapi kanker modern.

Penelitian Tazkyatun et al. (2025) pada terapi thalasemia juga memberikan wawasan relevan untuk terapi kanker. Teknik desain obat seperti structure-based dan ligand-based drug design memungkinkan pengembangan terapi gen dan molekul kecil. Prinsip yang sama dapat diaplikasikan dalam pengembangan terapi kanker yang personal dan berbasis target. Ini memperlihatkan bahwa pendekatan kimia medisinal bersifat universal dalam pengembangan terapi penyakit kronis. Dengan demikian, pendekatan ini harus terus didukung melalui penelitian lintas disiplin.

Dengan berbagai potensi yang telah diidentifikasi, sangat penting untuk mengatasi tantangan dalam pengembangan obat berbasis alam. Seperti dijelaskan dalam jurnal Tasya Agustina et al. (2025), tantangan meliputi kestabilan senyawa, replikasi hasil, serta uji toksisitas yang memadai. Namun, kemajuan dalam teknologi ekstraksi, formulasi, dan pemodelan molekuler membuka peluang besar untuk mengatasi hambatan tersebut. Oleh karena itu, sinergi antara ilmuwan, industri, dan pemerintah sangat diperlukan untuk mempercepat pengembangan obat antikanker dari alam. Tujuan untuk mengkaji kontribusi kimia medisinal dalam desain dan pengembangan senyawa alami sebagai kandidat obat antikanker.

## METODE

Penelitian ini menggunakan metode studi literatur dengan pendekatan kualitatif deskriptif. Metode studi literatur dengan pendekatan kualitatif deskriptif adalah metode yang digunakan untuk mengkaji dan mendeskripsikan data dari berbagai sumber pustaka secara sistematis dan mendalam tanpa menggunakan perhitungan statistik (Lesmono, 2021). Sumber data diperoleh dari artikel jurnal ilmiah nasional dan internasional yang relevan dengan topik kimia medisinal dan senyawa alami antikanker. Literatur dipilih berdasarkan kriteria inklusi yaitu fokus pada senyawa bioaktif, aktivitas antikanker, dan pendekatan desain obat. Analisis dilakukan dengan mengelompokkan informasi berdasarkan tema: metabolit sekunder, strategi

desain obat, dan interaksi molekuler. Hasil sintesis kemudian dijadikan dasar untuk menyusun kesimpulan dan rekomendasi pengembangan terapi kanker berbasis alam.

## HASIL DAN PEMBHASAN

### Peran Kimia Medisinal dalam Pengembangan Obat Antikanker

Kimia medisinal merupakan cabang ilmu kimia yang berfokus pada desain, sintesis, dan pengembangan senyawa kimia sebagai agen terapeutik untuk pengobatan berbagai penyakit, termasuk kanker (Dean, 2024). Dalam konteks terapi kanker, kimia medisinal berperan penting dalam pencarian senyawa bioaktif yang mampu menargetkan sel kanker secara spesifik (Khasanah, 2025). Dengan menggunakan pendekatan struktur-aktivitas, para peneliti dapat mengevaluasi efektivitas dan selektivitas senyawa terhadap target molekuler tertentu. Penelitian dari Amin et al. (2025) menekankan bahwa pendekatan ini dapat membantu mengurangi efek samping terapi konvensional yang bersifat tidak selektif. Oleh karena itu, kimia medisinal menjadi fondasi penting dalam inovasi terapi kanker yang lebih aman dan efektif.

Penggunaan kimia medisinal juga melibatkan eksplorasi senyawa dari sumber alami yang memiliki aktivitas biologis tinggi, seperti xanton dari kulit manggis. Penelitian oleh Amin et al. (2025) menunjukkan bahwa senyawa ini mampu menghambat proliferasi sel kanker melalui mekanisme penghambatan siklus sel dan induksi apoptosis. Selain itu, teknik analisis seperti QSAR dan molecular docking digunakan untuk memodifikasi struktur senyawa agar memiliki afinitas yang lebih tinggi terhadap targetnya. Dalam praktiknya, kimia medisinal turut membantu dalam mempercepat tahapan penemuan obat dari laboratorium menuju aplikasi klinis. Hal ini memungkinkan pengembangan terapi yang lebih personal dan terarah sesuai dengan tipe kanker yang dihadapi pasien (Marliza, 2023).

Sebagai ilmu interdisipliner, kimia medisinal mengintegrasikan farmakologi, biokimia, dan bioinformatika dalam proses desain obat. Integrasi ini memungkinkan identifikasi target molekuler dalam sel kanker dan perancangan senyawa yang mampu berinteraksi secara selektif dengan target tersebut. Menurut JURRIKES (2025), jalur sinyal seperti PI3K/Akt dan MAPK menjadi fokus utama dalam desain terapi molekuler karena keterlibatannya dalam pertumbuhan dan resistensi sel kanker. Dengan memahami jalur-jalur ini, pengembangan terapi dapat diarahkan untuk menekan aktivitas molekuler yang memicu keganasan. Oleh karena itu, kontribusi kimia medisinal sangat penting dalam menghasilkan terapi kanker berbasis target.

Kimia medisinal juga memainkan peran penting dalam pengembangan terapi kombinasi

yang memanfaatkan lebih dari satu senyawa aktif. Terapi kombinasi ini bertujuan meningkatkan efektivitas pengobatan sekaligus mengurangi kemungkinan resistensi obat. Seperti dijelaskan oleh Tazkyatun et al. (2025), pendekatan ini dilakukan melalui optimalisasi struktur kimia dan uji interaksi molekul terhadap reseptor kunci. Kombinasi antara terapi gen, chelating agent, dan induksi hemoglobin fetal dalam thalasemia dapat diadaptasi pula dalam konteks terapi kanker. Ini menunjukkan bahwa pendekatan multidimensi dalam kimia medisinal sangat fleksibel dan dapat disesuaikan dengan kebutuhan klinis.

Penelitian kimia medisinal memberikan kontribusi besar dalam memprediksi efek terapeutik dari senyawa-senyawa bioaktif. Melalui teknik pemodelan molekuler seperti docking dan QSAR, para peneliti dapat memperkirakan seberapa kuat senyawa akan berinteraksi dengan target biologisnya. Syarifah et al. (2025) menjelaskan bahwa prediksi ini penting untuk menyaring senyawa-senyawa dengan potensi tertinggi sebelum masuk ke tahap uji biologis. Selain itu, pemahaman terhadap hubungan struktur dan aktivitas (SAR) memungkinkan pengembangan senyawa yang lebih stabil dan aman digunakan. Dengan demikian, kimia medisinal berperan strategis dalam efisiensi dan akurasi penemuan obat.

Prediksi efek terapeutik juga memungkinkan proses pengembangan obat dilakukan lebih cepat dan hemat biaya. Penelitian Tazkyatun et al. (2025) menunjukkan bahwa pendekatan *in silico* dapat mengantikan sebagian besar tahapan eksperimental awal yang memerlukan biaya besar dan waktu lama. Teknik ini juga memungkinkan eksplorasi senyawa dari sumber alam yang belum diteliti secara luas. Kemajuan ini membuka peluang besar dalam memanfaatkan keanekaragaman hayati Indonesia sebagai sumber senyawa obat baru. Dengan demikian, kemajuan kimia medisinal memberikan harapan baru dalam pengembangan terapi kanker yang lebih efisien.

### Metabolit Sekunder dari Sumber Alam dan Aktivitas Antikanker

Metabolit sekunder adalah senyawa kimia yang dihasilkan oleh organisme hidup, terutama tumbuhan, yang bukan bagian dari metabolisme primer tetapi memiliki fungsi ekologi penting (Manurung, 2021). Senyawa ini meliputi alkaloid, flavonoid, tanin, terpenoid, dan fenol yang telah dikenal luas memiliki aktivitas biologis, termasuk sebagai antikanker. Syarifah et al. (2025) menyoroti bahwa metabolit sekunder telah menjadi sumber inspirasi utama dalam penemuan obat baru. Aktivitas antikanker dari senyawa ini biasanya dikaitkan dengan kemampuannya menginduksi apoptosis dan menghambat proliferasi sel kanker. Oleh karena itu, pemanfaatan metabolit sekunder menjadi fokus utama dalam pengembangan terapi kanker berbasis alam.

Flavonoid dan alkaloid merupakan dua kelompok senyawa yang paling banyak diteliti karena aktivitas antikankernya yang signifikan. Flavonoid bekerja melalui berbagai mekanisme, seperti penghambatan enzim tirosin kinase dan perlindungan terhadap stres oksidatif. Sementara itu, alkaloid seperti vincristine dari *Catharanthus roseus* telah digunakan secara luas dalam terapi leukemia. Penelitian oleh Tasya Agustina et al. (2025) menunjukkan bahwa flavonoid dari batang bajakah memiliki potensi sebagai agen antikanker dan antioksidan. Kandungan senyawa tersebut memperkuat peran penting metabolit sekunder sebagai agen terapi kanker yang alami dan relatif aman. Dengan pendekatan kimia medisinal, efektivitas senyawa ini dapat ditingkatkan melalui modifikasi struktur.

Senyawa terpenoid dan fenol juga menunjukkan potensi antikanker melalui berbagai mekanisme, termasuk penghambatan angiogenesis dan aktivitas sebagai anti-inflamasi. Syarifah et al. (2025) menjelaskan bahwa modifikasi senyawa terpenoid telah meningkatkan aktivitas antimikroba dan antikanker dalam berbagai studi. Teknik ekstraksi yang efisien, seperti superkritik dan ultrasonik, turut mendukung isolasi senyawa aktif tanpa merusak strukturnya. Hal ini memungkinkan eksplorasi lebih lanjut terhadap metabolit sekunder dari sumber alami yang sebelumnya kurang dimanfaatkan. Dengan demikian, metabolit sekunder memegang peranan penting dalam riset terapi kanker berbasis bahan alam.

Tanaman lokal Indonesia telah terbukti memiliki kandungan senyawa bioaktif yang potensial sebagai antikanker. Dhamayanti et al. (2025) mengidentifikasi tanaman seperti *Strychnos lucida*, *Averrhoa bilimbi*, dan *Typhonium flagelliforme* yang mengandung senyawa dengan nilai IC<sub>50</sub> dan afinitas ikatan tinggi terhadap reseptor kanker. Strychnine N-oxide dari *Strychnos lucida* menunjukkan nilai IC<sub>50</sub> sebesar 0,09 μM, menjadikannya salah satu kandidat paling poten. Senyawa squalene dari *Averrhoa bilimbi* menunjukkan afinitas sangat tinggi terhadap protein NUDT5. Hal ini menunjukkan bahwa tanaman Indonesia dapat menjadi sumber bahan baku pengembangan obat kanker masa depan. Dengan pendekatan kimia medisinal, senyawa-senyawa ini dapat dioptimalkan secara struktur dan aktivitas.

Penelitian lain juga menemukan bahwa *Christella arida* mengandung β-sitosterol dengan aktivitas sitotoksik tinggi berdasarkan uji LC<sub>50</sub>. Selain itu, senyawa stigmasterol dari *Ageratum conyzoides* menunjukkan afinitas lebih tinggi dari ligan alami dalam uji penambatan molekul. Menurut Dhamayanti et al. (2025), senyawa ini bekerja dengan menghambat reseptor estrogen dan progesteron yang berperan dalam proliferasi sel kanker payudara. Dengan demikian, tanaman ini

menunjukkan prospek tinggi sebagai terapi kanker hormonal. Validasi lebih lanjut melalui uji in vitro dan in vivo diperlukan untuk pengembangan formulasi obatnya.

Di daerah Bangka Belitung, batang bajakah (*Spatholobus littoralis* Hassk.) secara tradisional telah digunakan untuk mengobati kanker payudara. Tasya Agustina et al. (2025) melaporkan bahwa ekstrak etanol batang bajakah mengandung flavonoid dan alkaloid yang menunjukkan aktivitas antioksidan dan antikanker. Hasil skrining fitokimia menunjukkan reaksi positif terhadap senyawa fenolik yang dikenal memiliki aktivitas antiproliferatif. Masyarakat lokal telah lama memanfaatkan tanaman ini, namun penelitian ilmiah baru dilakukan belakangan ini. Ini menunjukkan pentingnya pelestarian dan eksplorasi pengetahuan tradisional dalam riset ilmiah modern.

### Strategi Desain Senyawa Antikanker Berdasarkan Pendekatan Kimia Medisinal

Pendekatan in silico dalam kimia medisinal sangat membantu dalam mendesain dan mengevaluasi senyawa antikanker secara efisien. Teknik seperti molecular docking, QSAR, dan farmakofor modeling memungkinkan peneliti mensimulasikan interaksi senyawa dengan target molekul kanker (Nurfadila, 2023). Dhamayanti et al. (2025) menekankan bahwa pendekatan ini penting untuk menyaring senyawa dengan afinitas ikatan tinggi sebelum dilakukan uji laboratorium. Melalui pemodelan ini, senyawa-senyawa dapat dievaluasi secara prediktif terhadap efektivitas dan selektivitasnya. Penggunaan pendekatan komputasi sangat relevan untuk menghemat waktu dan biaya dalam penelitian awal.

Dalam konteks desain obat kanker, QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship) digunakan untuk mengidentifikasi hubungan antara struktur kimia dan aktivitas biologisnya. Menurut JURRIKES (2025), pendekatan ini memungkinkan perancang obat untuk memodifikasi bagian molekul yang kritis terhadap interaksi biologis. Teknik ini juga digunakan dalam mengembangkan inhibitor spesifik terhadap target protein seperti HER-2 dan reseptor estrogen. Model QSAR memberikan wawasan kuantitatif terhadap perubahan kecil dalam struktur kimia yang berdampak besar pada aktivitas biologis. Dengan demikian, pendekatan ini memperkuat strategi desain berbasis target.

Molecular dynamics juga memainkan peran penting dalam menguji stabilitas interaksi senyawa dengan targetnya secara waktu nyata. Syarifah et al. (2025) mencatat bahwa pendekatan ini memungkinkan simulasi perilaku ligan dalam lingkungan biologis kompleks. Teknik ini menjadi pelengkap dari docking, memastikan bahwa interaksi yang tampak kuat tetap stabil dalam kondisi fisiologis. Kombinasi antara docking, QSAR, dan molecular dynamics membentuk kerangka kerja desain obat modern. Ini menegaskan peran

komputasi sebagai tulang punggung pengembangan senyawa antikanker.

Analisis interaksi senyawa dengan target molekuler merupakan tahap penting dalam meningkatkan selektivitas dan efikasi obat. Senyawa seperti xanton dari *Garcinia mangostana* menunjukkan afinitas tinggi terhadap protein kanker, sehingga menekan pertumbuhan dan metastasis tumor (JURRIKES, 2025). Interaksi tersebut melibatkan pengikatan pada situs aktif target seperti enzim atau reseptor yang berperan dalam jalur sinyal kanker. Dengan menganalisis jenis ikatan seperti hidrogen dan hidrofobik, peneliti dapat menyusun senyawa yang lebih selektif. Hal ini penting untuk menghindari kerusakan pada sel sehat yang menjadi kelemahan utama terapi konvensional.

Selain itu, interaksi ligand-target yang stabil juga berkaitan dengan pengurangan efek samping dan peningkatan efektivitas klinis. Tazkyatun et al. (2025) menyoroti pentingnya desain senyawa berbasis farmakofor untuk mencapai spesifikasi tinggi. Farmakofor merupakan model spasial dari fitur kimia penting yang diperlukan untuk interaksi dengan target. Dengan demikian, hanya senyawa dengan konfigurasi tertentu yang akan memiliki aktivitas terapeutik. Ini memperkuat pentingnya presisi dalam perancangan obat antikanker.

Pemahaman terhadap interaksi molekul-target juga membuka peluang dalam pengembangan senyawa multitarget. Pendekatan ini berguna dalam kanker yang melibatkan lebih dari satu jalur sinyal atau reseptor. Misalnya, senyawa yang dapat menghambat sekaligus jalur PI3K/Akt dan MAPK akan memiliki efek sinergis. JURRIKES (2025) menunjukkan bahwa strategi ini berpotensi mengatasi resistensi obat yang sering muncul dalam monoterapi. Oleh karena itu, interaksi molekuler menjadi elemen kunci dalam inovasi terapi kanker.

### Studi Kasus Senyawa Bioaktif Tanaman Lokal sebagai Terapi Kanker

Beberapa senyawa alami dari tanaman lokal Indonesia telah terbukti memiliki aktivitas antikanker yang kuat. Strychnine N-oxide dari *Strychnos lucida* menunjukkan IC<sub>50</sub> sebesar 0,09 µM dan bekerja menghambat reseptor estrogen-α, menjadikannya kandidat terapi kanker payudara yang potensial (Dhamayanti et al., 2025). Senyawa squalene dari *Averrhoa bilimbi* menunjukkan afinitas tertinggi sebesar -94,711 kcal/mol terhadap protein NUDT5. Stigmasterol dari *Ageratum conyzoides* berinteraksi kuat dengan reseptor hormon, memperkuat perannya sebagai kandidat terapi hormonal. Sementara β-sitosterol dari *Christella arida* memiliki potensi sitotoksik tinggi berdasarkan uji BSLT dengan LC<sub>50</sub> < 30 µg/mL. Senyawa mangiferin dari *Mangifera*

casturi menunjukkan aktivitas terhadap HER-2, target utama dalam kanker payudara.

Fokus pada senyawa yang telah diuji secara ilmiah memperlihatkan bahwa pendekatan ini sangat menjanjikan untuk pengobatan kanker. Semua senyawa tersebut telah dievaluasi melalui teknik *in silico* dan *in vitro*, memperkuat validitas ilmiahnya. Menurut Dhamayanti et al. (2025), pendekatan multidisiplin yang menggabungkan kimia medisinal, biologi molekuler, dan bioinformatika sangat efektif dalam pengembangan terapi kanker dari sumber alam. Senyawa-senyawa tersebut juga menunjukkan efek yang lebih ringan dibandingkan dengan kemoterapi konvensional. Ini menunjukkan peluang besar bagi pemanfaatan kekayaan hayati Indonesia.

Pengembangan obat dari senyawa alam menghadapi berbagai tantangan mulai dari sisi teknis hingga regulasi. Isolasi senyawa aktif dari tanaman memerlukan teknik dan alat canggih karena senyawa yang dihasilkan dalam jumlah kecil. Reproduksibilitas menjadi isu serius karena faktor lingkungan sangat memengaruhi kandungan senyawa. Produksi massal senyawa juga sering kali terhambat karena tanaman belum dibudidayakan secara luas. Oleh karena itu, kerja sama antara institusi riset dan industri sangat dibutuhkan.

### Tantangan dan Prospek Pengembangan Obat Antikanker Berbasis Alam

Tantangan	Penjelasan
Isolasi senyawa aktif	Sulitnya mengekstrak senyawa bioaktif dari tanaman dengan kemurnian tinggi.
Reproduksibilitas senyawa	Kandungan metabolit dapat bervariasi tergantung lokasi dan waktu panen.
Skala produksi	Keterbatasan bahan baku alami untuk produksi massal.
Stabilitas senyawa	Banyak senyawa alami tidak stabil pada suhu tinggi atau selama penyimpanan.
Evaluasi toksisitas	Uji toksisitas yang memadai diperlukan untuk menjamin keamanan senyawa.
Regulasi dan legalitas	Perizinan dan standar keamanan yang ketat dalam pengembangan fitofarmaka.
Pendanaan dan sumber daya	Keterbatasan dana dan fasilitas untuk riset komprehensif.

Menurut Ningsih (2024) stabilitas senyawa alami juga menjadi kendala karena banyak senyawa yang mudah terdegradasi dalam kondisi tertentu. Hal ini dapat mengurangi efektivitas dan masa simpan produk akhir. Untuk mengatasi ini, diperlukan teknik formulasi yang mampu menjaga kestabilan senyawa aktif. Selain itu, senyawa alami juga harus melalui proses uji toksisitas yang ketat untuk memastikan keamanannya bagi manusia. Uji tersebut mencakup evaluasi akut, subkronik, dan mutagenik sebelum dapat dikembangkan menjadi obat (Hidayati, 2024).

Masalah regulasi dan legalitas juga tidak dapat diabaikan, mengingat pengembangan

fitofarmaka harus mengikuti standar nasional dan internasional. Hal ini seringkali menjadi hambatan administratif bagi para peneliti dan industri lokal. Kebutuhan akan pendanaan dan fasilitas riset yang memadai juga menjadi tantangan dalam mempercepat proses pengembangan. Minimnya laboratorium dengan peralatan modern dan tenaga ahli memperlambat proses validasi ilmiah. Untuk itu, sinergi antara pemerintah, akademisi, dan industri sangat diperlukan.

Prospek pengembangan obat antikanker berbasis alam tetap sangat menjanjikan seiring dengan meningkatnya kesadaran masyarakat akan terapi yang lebih alami dan minim efek samping. Senyawa dari tanaman lokal Indonesia dapat menjadi solusi inovatif yang lebih murah dan efektif dibandingkan terapi konvensional. Dengan pemanfaatan teknologi dan riset multidisipliner, masa depan terapi kanker berbasis alam sangat cerah.

## SIMPULAN

Kimia medisinal memiliki kontribusi besar dalam pengembangan senyawa alami sebagai kandidat obat antikanker. Pendekatan ini memungkinkan optimasi senyawa melalui modifikasi struktur dan pemodelan komputasi yang efisien. Tanaman lokal Indonesia terbukti memiliki kandungan metabolit sekunder dengan aktivitas antikanker yang tinggi. Teknik seperti QSAR dan molecular docking memperkuat prediksi efektivitas senyawa tersebut. Dengan demikian, integrasi pendekatan kimia medisinal dan potensi alam Indonesia dapat menjadi solusi masa depan dalam terapi kanker.

## DAFTAR PUSTAKA

- Agustina, T. et al. (2025). Kajian Metabolit Sekunder Batang Bajakah dan Peran Kimia Medisinal dalam Pengembangan Obat Herbal Antikanker Payudara serta Antioksidan. *Journal of Innovative and Creativity*, 5(2), 27–34.
- Amin, S. et al. (2025). Kimia Medisinal dalam Terapi Kanker: Analisis Jalur Sinyal dan Interaksi Ligand-Target. *Jurnal Riset Rumpun Ilmu Kesehatan (JURRIKES)*, 4(1), 52–62.
- Amin, S., Aini, A. N., Utami, N. M. P., & Aryani, D. (2025). Kimia Medisinal dalam Terapi Kanker: Analisis Jalur Sinyal dan Interaksi Ligand-Target. *JURNAL RISET RUMPUN ILMU KESEHATAN*, 4(1), 52-62.
- Dean, M., Megawati, M., Efendi, M. R. S., Uyun, H. S. K., Zummah, A., Sari, M. W., ... & Niaty, S. M. (2024). *Kimia Farmasi*. Yayasan Tri Edukasi Ilmiah.
- Dhamayanti, J. L. et al. (2025). Eksplorasi Metabolit Sekunder Tanaman Lokal Indonesia untuk Terapi Kanker Payudara: Studi Literatur In Vitro dan In Silico. *Journal of Innovative and Creativity*, 5(2), 231–239.
- Hidayati, W., Habib, M. P. F., Dewi, F. R., Setiani, L. A., & Widodo, G. G. (2024). *Farmakologi Keperawatan*. PT. Sonpedia Publishing Indonesia.
- Khasanah, K., Ananta, I. G. B. T., Herlina, N., Yulianita, Y., Ambarwati, R., Sri, T., ... & Wahyuningrum, C. (2025). *Buku Ajar Pengantar Ilmu Farmasi*. PT. Sonpedia Publishing Indonesia.
- Lesmono, B., & Siregar, S. (2021). Studi Literatur Tentang Agency Theory. *Ekonomi, Keuangan, Investasi dan Syariah (EKUITAS)*, 3(2), 203-210.
- Manurung, H. (2021). *Tabat Barito (Ficus Deltoidea Jack) Kajian Budidaya, Kandungan Metabolit Sekunder, Bio-Aktivitas, Prospek Fitofarmakologis*. Deepublish.
- Marliza, H., Ananta, I. G. B. T., Rusmalina, S., Malo, K. H., Meray, N. W., Khasanah, K., ... & Pratiwi, D. (2023). *KIMIA DASAR: Teori Komprehensif*. PT. Sonpedia Publishing Indonesia.
- Ningsih, Y. F., Fauzi, M., Gunawan, E., Wati, H., Andini, S., Sawiji, R. T., ... & Judijanto, L. (2024). *Ilmu Farmasetika: Teori dan Praktik*. PT. Sonpedia Publishing Indonesia.
- Nurfadhlila, L., Muldianah, D., Nurdinayanthi, D. A., Rahmawati, D. S., Hartati, H., & Fadhilah, H. (2023). Review Artikel: Pemanfaatan Kimia Komputasi Dengan Berbagai Metode Dalam Menentukan Desain Senyawa Baru. *Journal of Pharmaceutical and Sciences*, 555-566.
- Putranto, A. S. (2022). Manajemen Kanker Kolorektal. *Medicinus*, 35(3), 3-10.
- Syarifah, S. N. L. et al. (2025). Evolusi Kimia Medisinal Pendekatan Berbasis Alam Dalam Penemuan Obat: Tinjauan Kimia Medisinal. *Journal of Innovative and Creativity*, 5(4), 10–16.
- Tazkyatun, J. N. et al. (2025). Peran Kimia Medisinal dalam Pengembangan Terapi Thalasemia: Strategi Desain dan Optimalisasi Obat. *Journal of Innovative and Creativity*, 5(2), 224–230.
- Wahyuni, W. T., Wasi'ah, F. N., Maulidiyah, I., Saqila, E., Eilma, S., Damayanti, O., ... & Ningsih, A. W. (2024). Artikel Review: Studi Fitokimia Dan Aktivitas Farmakologi Pada Tanaman Bidara (*Ziziphus Mauritiana Lamk*). *Jurnal Ilmiah Dan Karya Mahasiswa*, 2(1), 53-62.