

Rancangan Obat Berbantuan Komputer: Inovasi Alat untuk Permodelan

Maywan Hariono

Fakultas Farmasi, Universitas Sanata Dharma, Yogyakarta, Indonesia

mhariono@usd.ac.id

ABSTRAKSI

Rancangan Obat Berbantuan Komputer (ROBK) merupakan disiplin dari berbagai ragam ilmu yang saat ini sedang menarik untuk diaplikasikan baik pada penelitian dasar maupun penelitian tingkat lanjut. Pada awal era penemuan obat, peneliti mengalami kesulitan mendapatkan informasi mengenai hubungan antara struktur molekul obat dengan aktivitas farmakologinya. Penemuan memerlukan proses yang cukup panjang (± 20 tahun), dana yang besar dan kerjasama dari berbagai disiplin ilmu seperti biologi, kimia, komputasi, farmasi dan sebagainya. Dengan berkembangnya teknologi komputer disertai informasi molekul biologi (bioinformatika) beserta molekul kimia (kemoinformatika), suatu obat dapat dimodelkan terlebih dahulu dan disimulasi untuk memprediksi aktivitas obatnya sebelum diujicobakan ke binatang dan manusia. Hal ini bisa mengurangi panjangnya proses penemuan obat (*trial and error*) dan menghemat biaya penelitian karena hanya model obat yang diprediksi aktif yang akan diteliti lebih lanjut. Penggunaan perangkat lunak untuk permodelan obat yang saat ini banyak yang tidak berbayar meningkatkan animo berbagai disiplin ilmu untuk memanfaatkan teknologi komputasi untuk merancang obat secara rasional.