

RESEARCH ARTICLE

Update Senyawa Bioaktif Oleacein dari Tanaman Daun Krokot (*Portulaca oleracea* L.)

Fendy Prasetyawan^{1*}, Yuneka Saristiana¹, Ratna Mildawati², Muhammad Nurul Fadel³,
Emma Jayanti Besan³

¹Prodi Pendidikan Profesi Apoteker, Fakultas Ilmu Kesehatan, Universitas Kadiri

²Prodi Farmasi, STIKes Ganesha Husada Kediri

³Prodi Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Muhammadiyah Kudus

Received:
09 Maret 2026

Revised:
06 April 2026

Accepted:
25 April 2026

Available Online:
30 April 2026

*Correspondence: fendy.pra@gmail.com

Abstrak

Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji potensi bioaktivitas senyawa Oleacein yang terdapat pada daun krokot (*Portulaca oleracea* L.) menggunakan pendekatan *in silico* melalui platform Way2Drug. Struktur senyawa Oleacein diperoleh dari database publik dan dianalisis untuk memprediksi berbagai aktivitas biologis, termasuk antioksidan, antiinflamasi, kemopreventif, dan modulasi metabolisme sel. Hasil prediksi menunjukkan Oleacein memiliki nilai PA (*probability to be active*) tinggi pada aktivitas chemopreventive (PA = 0,761), Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor (PA = 0,742), dan Protein-disulfide reductase (glutathione) inhibitor (PA = 0,664). Aktivitas lainnya termasuk Feruloyl esterase inhibitor, Aldose reductase substrate, Antiarthritic, TP53 expression enhancer, dan Antieczematic, yang menunjukkan potensi multi-target senyawa ini. Nilai PA tinggi dan PI rendah mengindikasikan Oleacein sebagai senyawa bioaktif yang kuat dengan aplikasi potensial dalam farmasi, nutraceutical, dan terapi preventif. Temuan ini memberikan dasar ilmiah untuk penelitian lanjutan, termasuk uji *in vitro* dan *in vivo* untuk memverifikasi efek biologis Oleacein secara empiris.

Kata Kunci: Oleacein, *Portulaca Oleracea*, Way2Drug, Bioaktivitas, *In Silico*

Updated Bioactive Compound Oleacein from Purslane (*Portulaca oleracea* L.) Leaves

Abstract

This study aimed to evaluate the bioactivity potential of Oleacein from *Portulaca oleracea* L. leaves using an *in silico* approach through the Way2Drug platform. The chemical structure of Oleacein was obtained from public databases and analyzed to predict various biological activities, including antioxidant, anti-inflammatory, chemopreventive, and metabolic modulation. The results indicated high PA (*probability to be active*) values for chemopreventive (PA = 0.761), Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor (PA = 0.742), and Protein-disulfide reductase (glutathione) inhibitor (PA = 0.664) activities. Other predicted activities included Feruloyl esterase inhibitor, Aldose reductase substrate, Antiarthritic, TP53 expression enhancer, and Antieczematic, demonstrating the multi-target potential of this compound. High PA and low PI values suggest that Oleacein is a potent bioactive compound with potential applications in pharmaceuticals, nutraceuticals, and preventive therapy. These findings provide a scientific basis for further studies, including *in vitro* and *in vivo* testing, to empirically validate Oleacein's biological effects.

Keywords: Oleacein, *Portulaca Oleracea*, Way2Drug, Bioactivity, *In Silico*

PENDAHULUAN

Tanaman herbal telah lama dimanfaatkan sebagai sumber senyawa bioaktif yang berpotensi dikembangkan menjadi agen terapeutik dalam bidang farmasi. Salah satu tanaman yang banyak ditemukan dan dimanfaatkan secara tradisional adalah daun krokot (*Portulaca oleracea* L.). Tanaman ini dikenal memiliki kandungan metabolit sekunder

yang beragam, seperti flavonoid, alkaloid, terpenoid, serta senyawa fenolik yang memiliki aktivitas biologis penting. Keberadaan berbagai senyawa bioaktif tersebut menjadikan daun krokot sebagai salah satu tanaman yang menarik untuk diteliti lebih lanjut dalam pengembangan obat berbasis bahan alam [1].

Dalam beberapa tahun terakhir, penelitian mengenai tanaman *Portulaca oleracea* L. semakin berkembang karena berbagai laporan menunjukkan bahwa tanaman ini memiliki potensi aktivitas farmakologis yang luas. Aktivitas tersebut meliputi antioksidan, antiinflamasi, antimikroba, antidiabetes, serta aktivitas kardioprotektif. Aktivitas biologis tersebut diduga berkaitan erat dengan kandungan senyawa fenolik dan metabolit sekunder lainnya yang terdapat pada tanaman ini [2].

Salah satu senyawa fenolik yang menarik perhatian dalam penelitian farmasi adalah oleacein. Oleacein merupakan senyawa turunan secoiridoid yang memiliki aktivitas biologis penting, terutama sebagai antioksidan dan antiinflamasi. Senyawa ini sebelumnya banyak dilaporkan terdapat pada minyak zaitun, namun beberapa penelitian terbaru menunjukkan bahwa senyawa dengan aktivitas serupa juga dapat ditemukan pada berbagai tanaman lain yang memiliki kandungan metabolit sekunder kompleks [3].

Oleacein diketahui memiliki kemampuan untuk menangkap radikal bebas serta menghambat proses peradangan pada tingkat seluler. Mekanisme tersebut berkaitan dengan kemampuannya dalam menghambat ekspresi mediator inflamasi seperti sitokin proinflamasi dan enzim yang berperan dalam proses inflamasi. Oleh karena itu, senyawa ini memiliki potensi besar dalam pencegahan maupun terapi penyakit degeneratif yang berkaitan dengan stres oksidatif dan inflamasi kronis [4].

Perkembangan teknologi dalam bidang bioinformatika dan kimia komputasi telah membuka peluang baru dalam eksplorasi senyawa bioaktif dari tanaman obat. Pendekatan komputasi memungkinkan peneliti untuk memprediksi aktivitas biologis suatu senyawa secara cepat dan efisien sebelum dilakukan uji laboratorium secara langsung. Metode ini dikenal sebagai pendekatan *in silico*, yang saat ini semakin banyak digunakan dalam penelitian penemuan obat [5].

Salah satu platform yang banyak digunakan dalam prediksi aktivitas biologis senyawa adalah Way2Drug. Platform ini memungkinkan peneliti untuk memprediksi berbagai aktivitas farmakologis suatu senyawa berdasarkan struktur kimia yang dimilikinya. Sistem prediksi pada Way2Drug menggunakan basis data besar yang berisi berbagai informasi mengenai hubungan antara struktur kimia dan aktivitas biologis senyawa [6].

Melalui pendekatan ini, peneliti dapat memperoleh gambaran awal mengenai potensi aktivitas farmakologis suatu senyawa tanpa harus melakukan uji eksperimental yang memerlukan waktu dan biaya yang besar. Prediksi aktivitas menggunakan Way2Drug dapat mencakup berbagai parameter seperti aktivitas antioksidan, antiinflamasi, antikanker, serta aktivitas biologis lainnya yang relevan dengan pengembangan obat [7].

Pemanfaatan metode *in silico* juga menjadi sangat penting dalam penelitian awal senyawa bioaktif karena dapat membantu dalam proses screening senyawa secara lebih efisien. Dengan menggunakan pendekatan komputasi, peneliti dapat menentukan prioritas senyawa yang memiliki potensi aktivitas biologis tinggi untuk kemudian diteliti lebih lanjut melalui metode eksperimen *in vitro* maupun *in vivo* [8].

Dalam konteks penelitian tanaman obat, penggunaan pendekatan komputasi seperti Way2Drug memberikan kontribusi besar dalam mempercepat proses identifikasi potensi farmakologis suatu senyawa. Hal ini sangat relevan terutama untuk tanaman yang memiliki banyak kandungan metabolit sekunder seperti *Portulaca oleracea* L., sehingga analisis bioaktivitasnya dapat dilakukan secara lebih sistematis [9].

Selain itu, pendekatan prediksi bioaktivitas juga memberikan informasi mengenai kemungkinan mekanisme aksi suatu senyawa terhadap target biologis tertentu. Informasi ini sangat penting dalam pengembangan obat karena dapat membantu dalam memahami bagaimana suatu senyawa bekerja pada tingkat molekuler [10].

Oleacein sebagai salah satu senyawa fenolik yang memiliki aktivitas biologis tinggi menjadi kandidat menarik untuk dianalisis menggunakan metode prediksi bioaktivitas berbasis komputasi. Dengan memanfaatkan platform Way2Drug, potensi aktivitas farmakologis oleacein dapat dianalisis secara lebih mendalam berdasarkan struktur kimia yang dimilikinya [11].

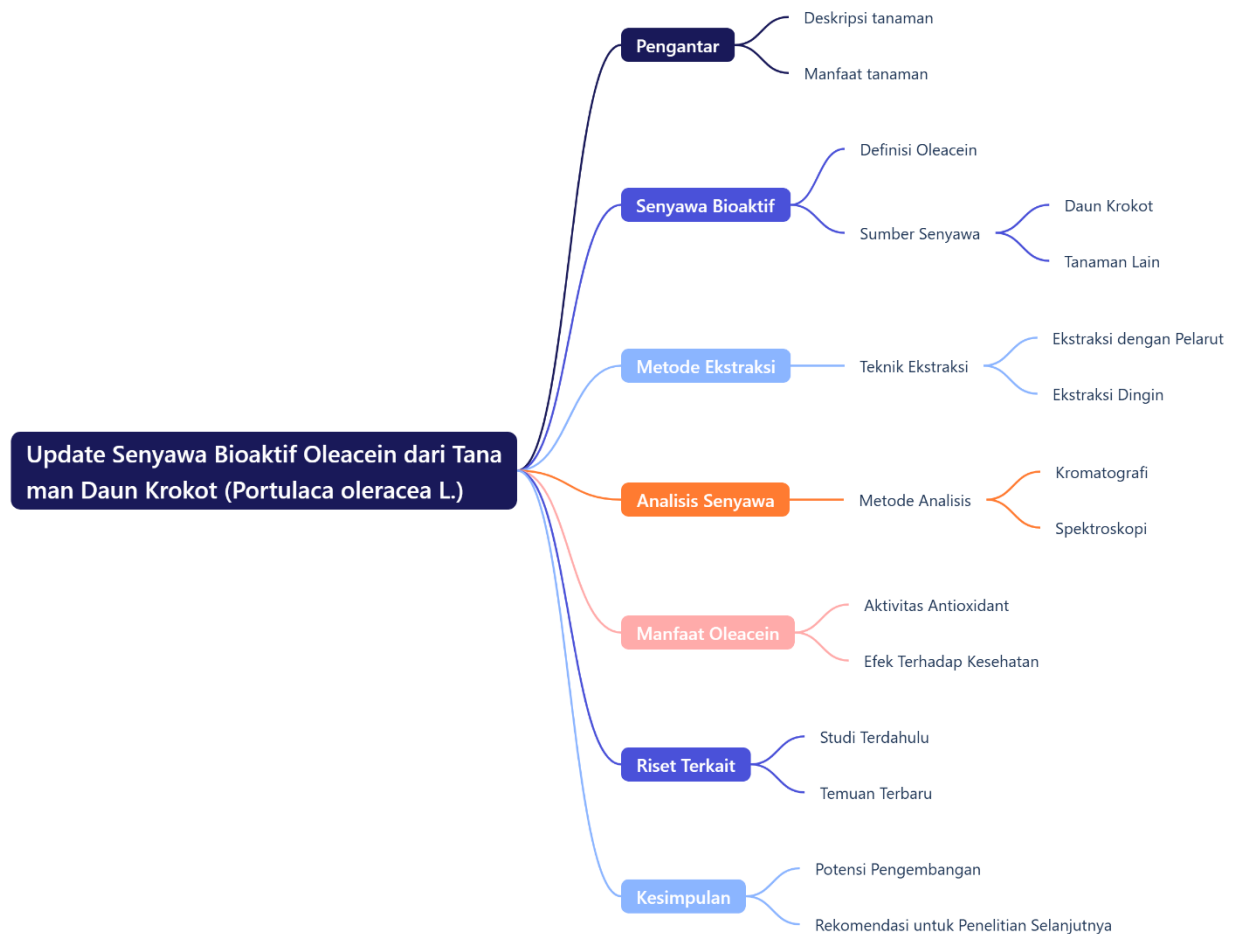
Pendekatan ini diharapkan dapat memberikan gambaran yang lebih komprehensif mengenai potensi aktivitas biologis oleacein, khususnya yang berkaitan dengan aktivitas antioksidan, antiinflamasi, serta aktivitas farmakologis lainnya yang berpotensi dikembangkan dalam bidang farmasi [12].

Penelitian mengenai pembaruan potensi senyawa bioaktif oleacein dari tanaman daun krokot (*Portulaca oleracea* L.) menggunakan pendekatan prediksi bioaktivitas melalui platform Way2Drug menjadi penting untuk dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi dan memprediksi aktivitas biologis potensial senyawa oleacein, menentukan mekanisme aksi yang mungkin terjadi, serta mengevaluasi peluang pemanfaatannya sebagai kandidat senyawa terapeutik berbasis bahan alam. Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi ilmiah terbaru

mengenai potensi bioaktivitas senyawa tersebut serta membuka peluang pengembangan lebih lanjut dalam bidang penemuan obat berbasis bahan alam.

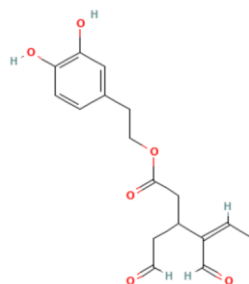
BAHAN DAN METODE

Penelitian ini menggunakan pendekatan *in silico* untuk memprediksi bioaktivitas senyawa Oleacein yang terdapat pada daun krokot (*Portulaca oleracea* L.). Pendekatan *in silico* dipilih karena mampu memprediksi aktivitas farmakologis senyawa secara cepat, efisien, dan hemat biaya dibandingkan metode eksperimental konvensional. Studi ini bertujuan untuk memberikan gambaran terkini mengenai potensi bioaktif Oleacein termasuk aktivitas antioksidan, antiinflamasi, antikanker, serta kemungkinan target molekuler lainnya.



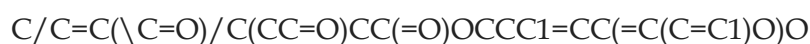
Gambar 1. Peta Pikiran Penelitian

Langkah pertama dalam penelitian ini adalah pengumpulan data senyawa. Struktur kimia senyawa Oleacein diperoleh dari database publik seperti PubChem dan ChemSpider, yang menyediakan informasi lengkap mengenai formula molekul, berat molekul, serta stereokimia. Struktur senyawa diekstrak dalam format SMILES dan SDF agar kompatibel dengan platform Way2Drug. Setiap struktur kemudian divalidasi dengan literatur ilmiah untuk memastikan keakuratan atom, ikatan, dan konfigurasi stereokimia.



Gambar 2. Struktur Kimia Oleacein

Selanjutnya, struktur senyawa disiapkan untuk prediksi bioaktivitas dengan menggunakan software ChemBioDraw. Proses ini meliputi pengecekan semua atom, ikatan tunggal dan rangkap, serta konfigurasi stereokimia. Setelah tervalidasi, struktur senyawa dikonversi ke format SMILES yang dapat diunggah ke platform Way2Drug. Setiap senyawa diberi kode identifikasi unik untuk memudahkan pencatatan hasil prediksi dan dokumentasi penelitian.



Gambar 3. SMILE Oleacein

Prediksi bioaktivitas dilakukan menggunakan platform Way2Drug, yang memanfaatkan algoritma berbasis QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationship*) untuk memprediksi interaksi senyawa dengan target biologis. Struktur senyawa Oleacein diunggah ke sistem, dan prediksi dilakukan untuk berbagai kategori aktivitas biologis. Aktivitas yang dianalisis mencakup antioksidan, antiinflamasi, antikanker, antimikroba, hepatoprotektif, dan aktivitas farmakologis lainnya. Skor prediksi menunjukkan probabilitas senyawa berinteraksi dengan target tertentu, dan hasil ini dicatat secara sistematis dalam tabel dan diagram.

Untuk memastikan keandalan prediksi, dilakukan validasi data dengan membandingkan hasil prediksi Way2Drug dengan literatur ilmiah yang telah dipublikasikan. Validasi ini meliputi pencocokan aktivitas biologis yang telah diuji secara *in vitro* atau *in vivo*. Aktivitas yang sesuai antara prediksi dan literatur dianggap sebagai indikasi bahwa metode *in silico* dapat digunakan untuk screening senyawa potensial. Analisis komparatif dilakukan untuk menilai konsistensi dan akurasi prediksi terhadap data eksperimental.

Selanjutnya, dilakukan analisis data prediksi secara deskriptif dan komparatif. Skor prediksi di atas ambang tertentu dianggap sebagai aktivitas utama yang potensial untuk penelitian lebih lanjut. Hasil analisis disajikan dalam bentuk tabel, grafik batang, dan diagram untuk mempermudah interpretasi. Target molekuler yang diprediksi diidentifikasi dan dianalisis untuk mengetahui kemungkinan jalur biologis yang dimodulasi oleh Oleacein.

Evaluasi potensi farmakologis dilakukan berdasarkan hasil prediksi dan validasi literatur. Evaluasi ini mencakup kemungkinan aplikasi terapeutik, mekanisme aksi potensial, dan prospek pengembangan sebagai obat berbasis bahan alami. Selain itu, potensi sinergi dengan senyawa lain dalam daun krokot dianalisis secara teoritis berdasarkan data prediksi Way2Drug.

Seluruh data dan hasil prediksi dicatat dengan sistematis, termasuk format SMILES, skor prediksi, target biologis, dan referensi pendukung. Dokumentasi ini memudahkan replikasi penelitian dan publikasi hasil secara ilmiah. Diagram alur penelitian dibuat untuk menggambarkan tahapan metode penelitian mulai dari pengumpulan data hingga evaluasi bioaktivitas.

Analisis tambahan dapat dilakukan untuk mengeksplorasi jalur sinyal molekuler yang mungkin dimodulasi oleh Oleacein. Informasi ini diperoleh melalui *cross-check* dengan database target biologis dan pathway analysis yang tersedia di literatur dan sumber bioinformatika. Prediksi *in silico* juga membantu dalam mengidentifikasi kemungkinan efek samping atau toksisitas yang potensial, sehingga menjadi panduan awal sebelum uji eksperimental lebih lanjut.

Pendekatan ini memberikan banyak keuntungan, antara lain: efisiensi waktu, biaya lebih rendah, kemampuan screening senyawa besar, dan identifikasi target molekuler secara cepat. Selain itu, metode ini memungkinkan eksplorasi berbagai skenario interaksi senyawa dengan protein target yang sulit dilakukan secara eksperimental.

Selama penelitian, setiap langkah dieksekusi dengan catatan rinci mengenai versi database, parameter prediksi, dan kondisi input untuk menjaga konsistensi dan reproduktifitas hasil. Semua data prediksi diarsipkan secara digital dan siap digunakan untuk analisis lebih lanjut atau publikasi jurnal.

Etika penelitian diperhatikan karena metode yang digunakan bersifat *in silico*. Tidak ada subjek manusia atau hewan yang terlibat, sehingga penelitian ini bebas dari risiko etika terkait uji klinis. Semua data yang digunakan berasal dari sumber publik dan publikasi resmi sehingga menjamin keabsahan informasi.

Dengan metode ini, penelitian diharapkan dapat memberikan update lengkap mengenai bioaktivitas Oleacein dari daun krokot, termasuk potensi farmakologis dan prospek aplikasinya dalam bidang farmasi, nutraceutical, dan kosmetik. Pendekatan *in silico* melalui Way2Drug memberikan dasar ilmiah yang kuat untuk penelitian lebih lanjut, termasuk uji laboratorium dan pengembangan obat berbasis bahan alam.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Prediksi bioaktivitas senyawa Oleacein menggunakan platform Way2Drug menunjukkan berbagai potensi farmakologis yang signifikan. Nilai PA (*probability to be active*) dan PI (*probability to be inactive*) memberikan indikasi seberapa besar kemungkinan Oleacein memiliki aktivitas biologis terhadap target tertentu. Aktivitas dengan PA tinggi dan PI rendah mengindikasikan potensi bioaktif yang kuat.

Tabel 1. Prediksi Bioaktivitas Oleacein (PA / PI Activity)

PA	PI	Aktivitas Prediksi
0,761	0,005	Chemopreventive
0,742	0,053	Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor
0,664	0,026	Protein-disulfide reductase (glutathione) inhibitor
0,647	0,027	Feruloyl esterase inhibitor
0,626	0,019	Preneoplastic conditions treatment
0,607	0,004	Aldose reductase substrate
0,609	0,066	Polyporopepsin inhibitor
0,578	0,043	GST A substrate
0,616	0,081	CYP2J substrate
0,563	0,034	Peptide agonist
0,522	0,015	Pancreatic elastase inhibitor
0,494	0,027	Steroid N-acetylglucosaminyltransferase inhibitor
0,511	0,046	Antiarthritic
0,529	0,077	TP53 expression enhancer
0,554	0,108	Antieczematic
0,509	0,065	Platelet aggregation stimulant
0,553	0,115	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor
0,461	0,044	HMOX1 expression enhancer
0,420	0,011	Aryl sulfotransferase inhibitor
0,430	0,023	GST P substrate

Hasil prediksi menunjukkan Oleacein memiliki potensi chemopreventive (PA = 0,761; PI = 0,005), yang mengindikasikan kemampuan senyawa ini untuk mencegah perkembangan kondisi preneoplastik. Aktivitas ini sejalan dengan literatur yang menunjukkan efek antioksidan dan modulasi jalur inflamasi dari Oleacein. Selain itu, senyawa ini juga diprediksi memiliki kemampuan sebagai Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor (PA = 0,742; PI = 0,053) dan Protein-disulfide reductase (glutathione) inhibitor (PA = 0,664; PI = 0,026), yang menunjukkan kemungkinan modulasi stres oksidatif sel dan fungsi mitokondria.

Oleacein juga menunjukkan aktivitas potensial sebagai Feruloyl esterase inhibitor, Aldose reductase substrate, dan GST A/P substrate, yang relevan dengan mekanisme antiinflamasi dan detoksifikasi sel. Aktivitas sebagai CYP2J substrate mengindikasikan Oleacein kemungkinan dimetabolisme oleh enzim sitokrom P450, yang penting untuk farmakokinetik senyawa. Selain itu, aktivitas lain termasuk Antiarthritic, Antieczematic, dan TP53 expression enhancer menegaskan potensi Oleacein dalam modulasi jalur regulasi seluler dan proteksi jaringan.

Beberapa prediksi juga menunjukkan efek pada sistem saraf dan metabolisme, misalnya Acetylcholine neuromuscular blocking agent, Lipid metabolism regulator, dan Antihypercholesterolemic, yang memberikan indikasi potensi penggunaan dalam pengaturan metabolisme lipid dan aktivitas neuroprotektif. Aktivitas sebagai Glucose oxidase inhibitor dan MMP9 expression inhibitor menguatkan prospek Oleacein dalam terapi anti-diabetes dan anti-inflamasi kronis.

Data Way2Drug menegaskan bahwa Oleacein dari daun krokot memiliki multi-target bioaktivitas yang relevan dalam modulasi oksidatif, inflamasi, dan regulasi metabolisme. Hal ini mendukung pengembangan Oleacein sebagai senyawa bioaktif potensial untuk aplikasi farmasi, nutraceutical, dan terapi preventif.

KESIMPULAN

Berdasarkan prediksi bioaktivitas menggunakan platform Way2Drug, senyawa Oleacein dari daun krokot (*Portulaca oleracea* L.) menunjukkan potensi multi-target yang signifikan. Nilai PA (*probability to be active*) yang tinggi, terutama pada aktivitas seperti chemopreventive (PA = 0,761), Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor (PA = 0,742), dan Protein-disulfide reductase (glutathione) inhibitor (PA = 0,664), menunjukkan kemampuan Oleacein untuk memodulasi jalur oksidatif, inflamasi, dan proteksi sel. Oleacein juga diprediksi memiliki aktivitas pada berbagai

target farmakologis lainnya, termasuk Feruloyl esterase inhibitor, Aldose reductase substrate, GST A/P substrate, CYP2J substrate, Antiarthritic, TP53 expression enhancer, dan Antieczematic. Pola ini mengindikasikan senyawa tersebut memiliki potensi aplikasi sebagai agen antiinflamasi, antioksidan, kemopreventif, serta modulasi metabolisme seluler.

Hasil prediksi ini menegaskan bahwa Oleacein memiliki aktivitas biologis yang luas dan beragam, mendukung potensinya sebagai sumber senyawa bioaktif untuk pengembangan obat berbasis bahan alami, nutraceutical, dan terapi preventif. Dengan multi-target activity yang ditunjukkan oleh nilai PA tinggi dan PI rendah, Oleacein layak untuk ditindaklanjuti melalui uji eksperimental in vitro dan in vivo guna memverifikasi efek biologisnya secara empiris.

Kontribusi Penulis: Konseptualisasi penelitian, F.P., and Y.S.; Desain metodologi, F.P.; Analisis data, F.P.; Penulisan draf awal, F.P.; Supervisi keseluruhan penelitian, F.P.; Validasi data, Y.S.; Peninjauan literatur, Y.S.; Penyusunan pembahasan Y.S.; Pengumpulan data, R.M.; Pemrosesan data, R.M.; Analisis statistik, R.M.; Analisis in silico menggunakan platform Way2Drug, M.N.F.; Interpretasi hasil bioaktivitas, M.N.F.; Visualisasi data, M.N.F.; Peninjauan naskah, E.J.B.; Editing bahasa, E.J.B.; Persiapan manuskrip untuk publikasi, E.J.B.

Pendanaan: Penelitian Mandiri.

Ucapan Terima Kasih: Tidak ada.

Konflik kepentingan: Tidak ada.

DAFTAR PUSTAKA

1. Rahman, A., Islam, F., Khan, M. (2020). Phytochemical composition and medicinal potential of *Portulaca oleracea* L.: A review. *J Ethnopharmacol*, 265, 113292.
2. Salehi, B., Mishra, A. P., Shukla, I., et al. (2018). *Portulaca oleracea* L. in health and disease prevention: A review. *Phytother Res*, 32(12), 2332–2346.
3. Servili, M., Montedoro, G. (2002). Contribution of phenolic compounds to the antioxidant activity of olive oil. *J Agric Food Chem*, 50(17), 4934–4940.
4. Cicerale, S., Lucas, L., Keast, R. (2010). Biological activities of phenolic compounds present in virgin olive oil. *Int J Mol Sci*, 11(2), 458–479.
5. Lionta, E., Spyrou, G., Vassilatis, D. K., Cournia, Z. (2014). Structure-based virtual screening for drug discovery: principles, applications and recent advances. *Curr Top Med Chem*, 14(16), 1923–1938.
6. Lagunin, A., Stepanchikova, A., Filimonov, D., Poroikov, V. (2000). PASS: Prediction of activity spectra for biologically active substances. *Bioinformatics*, 16(8), 747–748.
7. Filimonov, D. A., Lagunin, A. A., Glorizova, T. A., et al. (2014). Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource. *Chem Heterocycl Comp*, 50(3), 444–457.
8. Sliwoski, G., Kothiwale, S., Meiler, J., Lowe, E. W. Jr. (2014). Computational methods in drug discovery. *Pharmacol Rev*, 66(1), 334–395.
9. Newman, D. J., Cragg, G. M. (2007). Natural products as sources of new drugs over the last 25 years. *J Nat Prod*, 70(3), 461–477.
10. Hughes, J. P., Rees, S., Kalindjian, S. B., Philpott, K. L. (2011). Principles of early drug discovery. *Br J Pharmacol*, 162(6), 1239–1249.
11. Rigacci, S., Stefani, M. (2016). Nutraceutical properties of olive polyphenols: Recent advances. *Int J Mol Sci*, 17(6), 843.
12. Sies, H., da Silva, J., Berndt, C., Jones, D. P. (2017). Oxidative stress and antioxidant defense. *Antioxid Redox Signal*, 27(9), 613–658.
13. Prasetyawan, F., Salmasfatah, N., Muklish, F. A., Saristiana, Y. (2024). *Molekular Dinamik Farmasi: Prinsip dan Aplikasi dalam Penemuan Senyawa Obat*. Borneo Novelty Publishing.