MOLECULAR DOCKING SENYAWA METABOLIT SEKUNDER SEMBUNG RAMBAT (*MIKANIA CORDATA* (Burm. f) B.L. Rob.) TERHADAP PROTEIN Bcl-2 PADA SEL KANKER PAYUDARA SERTA IMPLEMENTASINYA DALAM VIDEO TUTORIAL MENGGUNAKAN PYRX 0.8

SKRIPSI

Oleh:

STEFANY THERISIA

F1061221018

PROGRAM STUDI PENDIDIKAN KIMIA

JURUSAN PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN

FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN

UNIVERSITAS TANJUNGPURA

PONTIANAK

2026

MOLECULAR DOCKING SENYAWA METABOLIT SEKUNDER SEMBUNG RAMBAT (*MIKANIA CORDATA* (Burm. f) B.L. Rob.) TERHADAP PROTEIN Bcl-2 PADA SEL KANKER PAYUDARA SERTA IMPLEMENTASINYA DALAM VIDEO TUTORIAL MENGGUNAKAN PYRX 0.8

SKRIPSI

Oleh:

STEFANY THERISIA

F1061221018

PROGRAM STUDI PENDIDIKAN KIMIA

JURUSAN PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN

FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN

UNIVERSITAS TANJUNGPURA

PONTIANAK

2026

LEMBAR PENGESAHAN

***MOLECULAR DOCKING* METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (*Mikania cordata* (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP PROTEIN Bcl-2 PADA SEL KANKER PAYUDARA SERTA IMPLEMENTASINYA DALAM VIDEO TUTORIAL MENGGUNAKAN PYRX 0.8**

STEFANY THERISIA
F1061221018

Disetujui:

Pembimbing I	Pembimbing II
Prof. Dr. Masriani, M.Si., Apt.	Dr. Ihsanul Arief, M.Sc
NIP. 197105092000032001	NIDN. 1112038801

Disahkan
Dekan FKIP UNTAN

Prof. Dr. Ahmad Yani T, M.Pd.
NIP. 196604011990021001

Lulus tanggal : 08 Desember 2025

LEMBAR PENGESAHAN

***MOLECULAR DOCKING* METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (*Mikania cordata* (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP PROTEIN Bcl-2 PADA SEL KANKER PAYUDARA SERTA IMPLEMENTASINYA DALAM VIDEO TUTORIAL MENGGUNAKAN PYRX 0.8**

STEFANY THERISIA
F1061221018

Disetujui Oleh:

Pembimbing I	Pembimbing II
Prof. Dr. Masriani, M.Si., Apt.	Dr. Ihsanul Arief, M.Sc
NIP. 197105092000032001	NIDN. 1112038801

Penguji I	Penguji II
Dr. Ari Widiyantoro, S.Si., M.Si.	Eni Mayasari, M.Pd.
NIP. 197304012000121001	NIP. 199005182024062001

Mengetahui
Ketua Jurusan Pendidikan Matematika dan IPA

Dr. Kurnia Ningsih, M.Pd.
NIP. 196703191991012001

LEMBAR PENGESAHAN

***MOLECULAR DOCKING* METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (*Mikania cordata* (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP PROTEIN Bcl-2 PADA SEL KANKER PAYUDARA SERTA IMPLEMENTASINYA DALAM VIDEO TUTORIAL MENGGUNAKAN PYRX 0.8**

STEFANY THERISIA
F1061221018

Disetujui Oleh:

Pembimbing I	Pembimbing II
Prof. Dr. Masriani, M.Si., Apt.	Dr. Ihsanul Arief, M.Sc
NIP. 197105092000032001	NIDN. 1112038801

Penguji I	Penguji II
Dr. Ari Widiyantoro, S.Si., M.Si.	Eni Mayasari, M.Pd.
NIP. 197304012000121001	NIP. 199005182024062001

Mengetahui
Ketua Program Studi Pendidikan Kimia

Prof. Erlina, M.Pd., Ph.D
NIP. 197905172006042002

LEMBAR PENGESAHAN

***MOLECULAR DOCKING* METABOLIT SEKUNDER DARI SEMBUNG RAMBAT (*Mikania cordata* (Burm.f.) B.L.Rob) TERHADAP PROTEIN Bcl-2 PADA SEL KANKER PAYUDARA SERTA IMPLEMENTASINYA DALAM VIDEO TUTORIAL MENGGUNAKAN PYRX 0.8**

STEFANY THERISIA
F1061221018

Disetujui Oleh:

Pembimbing I	Pembimbing II
Prof. Dr. Masriani, M.Si., Apt.	Dr. Ihsanul Arief, M.Sc
NIP. 197105092000032001	NIDN. 1112038801

Mengetahui,

Dekan FKIP UNTAN	Ketua Jurusan PMIPA
Prof. Dr. Ahmad Yani T, M.Pd.	Dr. Kurnia Ningsih, M.Pd.
NIP. 19660401199021001	NIP. 196703191991012001

PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN

Saya yang bertanda tangan d bawah ini :

Nama : Stefany Therisia

NIM : F1061221018

Jurusan/Program Studi : PMIPA/Pendidikan Kimia

Menyatakan bahwa dengan proposal yang berjudul "*Molecular Docking* Metabolit Sekunder Sembung Rambat (*Mikania Cordata* (Burm. F) B.L. Rob.) Terhadap Protein Bcl-2 pada Sel Kanker Payudara serta Implementasinya dalam Video Pembelajaran Kimia Farmasi" ini merupakan hasil karya sendiri, bukan merupakan pengambilalihan tulisan atau pikiran orang lain yang saya akui sebagai tulisan atau hasil pikiran saya sendiri, kecuali kutipan–kutipan dalam naskah ini yang sudah dicantumkan sebelumnya.

Apabila dikemudian hari terbukti dan dapat dibuktikan proposal ini hasil jiplakan, saya bersedia menerima sanksi atas perbuatan tersebut,

Pontianak, Desember 2025

Yang membuat persetujuan



Stefany Therisia

F1061221018

ABSTRAK

Kanker payudara tetap menjadi salah satu penyebab utama kematian terkait kanker pada perempuan di seluruh dunia. Protein Bcl-2 sering diekspresikan secara berlebihan pada sel kanker payudara dan menjadi target terapeutik yang penting. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi inhibisi dari 36 metabolit sekunder *Mikania cordata* terhadap Bcl-2 menggunakan pendekatan molecular docking. Simulasi docking dilakukan menggunakan AutoDock Vina yang terintegrasi dalam PyRx 0.8, dan interaksi ligan–protein dianalisis menggunakan BIOVIA Discovery Studio 2021. Di antara semua senyawa yang diuji, friedelin (−8,6 kcal/mol) menunjukkan afinitas ikatan terkuat, diikuti oleh epifridelanol (−8,2 kcal/mol) dan cordatolide (−8,2 kcal/mol) dengan interaksi kunci melibatkan residu ALA97, ARG143, dan GLY142. Secara keseluruhan, cordatolide, mikanin, dan kadinana seskuiterpena menunjukkan karakteristik farmakologis paling menjanjikan, sehingga berpotensi sebagai kandidat utama untuk terapi kanker payudara. Validasi eksperimental lebih lanjut diperlukan untuk memastikan aktivitas biologis dan keamanannya. Selain itu, penelitian ini juga merancang video tutorial penggunaan PyRx 0.8 dalam molecular docking pada materi hubungan struktur dan aktivitas biologis senyawa. Video dilengkapi dengan file siap pakai dan buku *troubleshooting* sebagai media pembelajaran yang memudahkan mahasiswa dalam memahami dan mempraktikkan proses docking.

Kata kunci : Antikanker; protein bcl-2; kanker payudara; penambatan molekuler; *Mikania cordata*

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan ke hadirat Tuhan Yang Maha Esa atas limpahan rahmat dan karunia-Nya sehingga proposal penelitian ini dapat disusun dengan baik dan tepat waktu. Penelitian yang diajukan berjudul "*Molecular Docking* Metabolit Sekunder Sembung Rambat (*Mikania Cordata* (Burm. F) B.L. Rob.) Terhadap Protein Bcl-2 pada Sel Kanker Payudara Serta Implementasinya Dalam Video Pembelajaran Kimia Farmasi". Penelitian ini diharapkan dapat memberikan kontribusi positif, serta memberikan manfaat bagi berbagai pihak terkait.

Dalam proses penyusunan proposal ini, penulis sangat menyadari bahwa kelancaran serta keberhasilannya tidak terlepas dari dukungan, bimbingan, serta masukan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, dengan penuh kasih, penulis mengucapkan terima kasih kepada :

1. Bapak Dr. H. Ahmad Yani T, M.Pd. selaku Dekan, yang telah memberikan dukungan dan fasilitas selama proses penyusunan proposal ini.
2. Ibu Dr. Kurnia Ningsih, M.Pd. selaku Ketua Jurusan PMIPA, yang telah memberikan arahan dan dukungan dalam penyusunan proposal ini.
3. Ibu Erlina, S.Pd., M.Pd., Ph.D. selaku Koordinator Program Studi Pendidikan Kimia sekaligus Pembimbing Akademik penulis, yang telah memberikan bimbingan, arahan, serta dukungan moral selama proses perkuliahan dan penyusunan proposal.
4. Ibu Dr. Masriani, M.Si., Apt. selaku Pembimbing I dan Bapak Dr. Ihsanul Arief, M.Sc. selaku Pembimbing II, yang telah memberikan bimbingan, arahan,

serta masukan dengan penuh kesabaran dan keikhlasan selama penyusunan proposal ini.

5. Bapak Prof. Dr. Ary Widyantoro, M.Si. selaku Penguji I dan Ibu Eni Mayasari, M.Pd. selaku Penguji II, yang telah memberikan saran dan masukan yang konstruktif demi penyempurnaan proposal ini.
6. Orang tua penulis, Bapak Bismar Pardomuan Simanjuntak dan Ibu Rumbungan Butar Butar, serta saudara Theofilus Agrian Simanjuntak dan Iferelda Irene Simanjuntak beserta keluarga besar, yang senantiasa memberikan doa, kasih sayang, serta dukungan baik secara moral maupun materi.
7. Sahabat dan rekan seperjuangan, Tery, Rosiana, Rafif, Inna, Dian, Aldi, Cici, Tiana, Waviza, Elisse, Valencia, Amalia, Laurin, Harleony, Juana, Sheren, serta seluruh mahasiswa S-1 Pendidikan Kimia angkatan 2022, yang telah memberikan dukungan, semangat, dan motivasi selama proses penyusunan proposal ini.
8. Semua pihak yang telah membantu, baik secara langsung maupun tidak langsung, yang tidak dapat disebutkan satu per satu, atas segala dukungan yang diberikan kepada penulis

DAFTAR ISI

PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN 2
KATA PENGANTAR 9
DAFTAR TABEL 14
BAB I 1
A. Latar Belakang 1
B. Rumusan Masalah 4
C. Tujuan Penelitian 4
D. Manfaat Penelitian 5
E. Definisi Operasional 5
3. Protein Bcl-2 dalam Kanker Payudara 6
4. Molecular Docking 6
BAB II 9
1. Sembung Rambat (*Mikania cordata*) 9
2. Kanker Payudara 18
4.1. Terapi Target 20
4.2. Kemoterapi 21
5. *Molecular Docking* 24
5.2. Jenis-Jenis *Docking* 25
5.2.1. *Lock and key (rigid docking)* 25
5.2.2. *Flexible ligand and rigid receptor docking* 25
5.2.3. *Flexible ligand flexible receptor docking* 26
5.3. Interaksi Protein-ligan 26
a. Interaksi Hidrofobik (*Hydrophobic Interaction*) 26
b. Ikatan Hidrogen (*Hydrogen Bond*) 26
c. Interaksi Elektrostatik (*Ionic*) 27
d. Gaya *Van Der Waals* 27
BAB III 33
A. Jenis Penelitian 33

B. Waktu dan Tempat Penelitian 33
C. Variabel Penelitian 33
D. Bahan dan Alat 34
a. Bahan 34
b. Alat 34
1. Pengunduhan Makromolekul 35
2. Preparasi Protein (*Receptor*) 35
4. Preparasi Ligan Pembanding 36
5. Prediksi ADME (Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Eliminasi) 37
10. Proses *Molecular Docking* 39
11. Visualisasi Hasil *Docking* 40
2. Prosedur Pengembangan 42
1. Analisis (*Analyze*) 42
2. Desain (*Design*) 43
3. Analisis Data 45
1. Sifat Fisikokimia 45
2. Molecular Docking 45
BAB IV 47
1. Validasi Docking 47
2. Molecular Docking 48
3. Analisis Fisikokimia 55
4. Analisis Farmakokinetik 56
5. Desain Video Pembelajaran 59
BAB V 62
DAFTAR PUSTAKA 64
LAMPIRAN 74

DAFTAR GAMBAR

Figure 1. Daun dan batang M. cordata (a) Bunga M. cordata (b) 9
Figure 2**.** Hasil Re-docking Native 1Y1..... 47
Figure 3. Visualisasi Interaksi dari (a) doxorubicin (b) epifridelanol (c) friedelin (d) cordatolide..... 54

DAFTAR TABEL

Table 1. Struktur Metabolit sekunder M. cordata *(Sajid et al., 2019)* 10

Table 2. Faktor Internal dan Eksternal Kanker Payudara Secara Umum 17

Table 3. Storyboard Video Pembelajaran Molecular Docking Mata Kuliah Kimia Farmasi 37

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Kanker payudara merupakan penyebab utama kematian akibat kanker pada perempuan di dunia, termasuk di Indonesia yang mencatat sekitar 65.000 kasus baru per tahun (Kemenkes, 2020; Siegel et al., 2025). Meskipun berbagai terapi seperti, radioterapi, terapi hormon, dan kemoterapi telah digunakan, efektivitasnya masih terbatas terutama pada kasus metastasis dan resistensi obat (Cahyawati, 2018; Knoepfler, 2009). Doxorubicin adalah kemoterapi lini pertama, namun sering menimbulkan efek samping berat seperti anemia, leukopenia, neutropenia, kerontokan rambut, juga resistensi obat yang berpengaruh pada kualitas hidup pasien (Chabner, B. A., & Longo, 2011; Kustanto et al., 2023).

Salah satu penyebab utama resistensi terapi pada kanker payudara adalah gangguan jalur apoptosis, di mana protein Bcl-2 berperan sebagai regulator anti-apoptosis (Qian et al., 2022; Yang et al., 1997). Protein ini diketahui sering terekspresi berlebihan pada sel kanker payudara dan berperan menurunkan sensitivitas terhadap doxorubicin (Hafezi & Rahmani, 2021). Oleh karena itu, Bcl-2 menjadi target penting dalam pengembangan terapi kanker payudara.

Produk alam kini banyak dikaji sebagai sumber inhibitor Bcl-2 karena potensi toksisitas yang lebih rendah dibandingkan agen kemoterapi konvensional (Olayiwola & Gollahon, 2024). *Mikania cordata* merupakan salah satu tanaman obat yang memiliki aktivitas farmakologis luas, termasuk antibakteri (Al Nayeem et

al., 2011), antiinflamasi (Siddiqui et al., 2018), dan antikanker (Uy et al., 2015). Beberapa metabolit sekundernya, seperti cadinane sesquiterpene dan terpenoid, telah berhasil diisolasi (Sajita Sajid et al., 2019; Siddiqui et al., 2018; Singh, 2022). Namun demikian, kajian mengenai mekanisme molekuler senyawa bioaktifnya, khususnya interaksi dengan protein Bcl-2, masih terbatas.

Molecular docking merupakan metode in silico yang efektif untuk menilai potensi inhibitor melalui prediksi interaksi ligan-protein, afinitas ikatan, serta potensi inhibisi sebelum dilakukan pengujian laboratorium (Othman et al., 2025). Ketika dikombinasikan dengan analisis ADME dan toksisitas, metode ini mampu mengidentifikasi kandidat obat yang relevan secara farmakologis secara lebih cepat dan efisien (Agu et al., 2023).

Berdasarkan hal tersebut, penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi 36 metabolit bioaktif dari *Mikania cordata* sebagai inhibitor Bcl-2 melalui molecular docking yang dilengkapi analisis drug-likeness, farmakokinetik, sifat fisikokimia, dan toksisitas, sehingga dapat diperoleh kandidat senyawa alam yang potensial untuk dikembangkan sebagai terapi alternatif kanker payudara.

Selain itu, penelitian ini juga dilatarbelakangi oleh kebutuhan pembelajaran pada mata kuliah Kimia Farmasi, khususnya pada materi hubungan struktur dan aktivitas biologis senyawa yang melibatkan pemahaman konsep interaksi ligan–protein secara visual dan aplikatif. Berdasarkan hasil wawancara pada pengampu dan mahasiswa yang mengikuti mata kuliah ini, bahan ajar yang tersedia umumnya masih bersifat teoritis. Meskipun telah tersedia berbagai video pembelajaran daring, sebagian besar belum terstruktur sesuai alur praktikum, tidak dilengkapi dengan file

pendukung, serta menggunakan contoh kasus yang tidak kontekstual dengan materi perkuliahan, sehingga kurang efektif digunakan sebagai media belajar mandiri.

Hasil analisis kebutuhan menunjukkan bahwa sebagian besar, yaitu 8 dari 10 mahasiswa masih mengalami kesulitan dalam memahami tahapan molecular docking secara praktis, mulai dari preparasi ligan dan reseptor hingga interpretasi hasil interaksi. Oleh karena itu, diperlukan pengembangan media pembelajaran yang tidak hanya menyajikan penjelasan prosedural, tetapi juga memberikan pengalaman belajar yang terarah dan aplikatif. Video tutorial dipilih karena mampu mengintegrasikan aspek visual, prosedural, dan demonstratif secara simultan, sehingga lebih efektif dalam menjelaskan proses yang bersifat teknis dan bertahap (Yuanta, 2019).

Video tutorial yang dikembangkan dalam penelitian ini dirancang secara sistematis dan dilengkapi dengan file siap pakai serta buku *troubleshooting*. Penyediaan file siap pakai bertujuan untuk mengurangi beban kognitif mahasiswa pada tahap awal pembelajaran, sehingga dapat lebih fokus memahami alur proses docking. Sementara itu, buku *troubleshooting* disusun untuk membantu mahasiswa mengatasi kendala teknis yang sering muncul secara mandiri, sehingga meningkatkan kemandirian belajar dan efektivitas penggunaan media.

Dengan demikian, penelitian ini tidak hanya berkontribusi dalam memberikan dasar ilmiah bagi pengembangan kandidat obat kanker payudara dari *Mikania cordata* melalui pendekatan *in silico*, tetapi juga mengisi kesenjangan dalam penyediaan media pembelajaran yang terstruktur, kontekstual, dan aplikatif untuk mendukung pemahaman mahasiswa pada mata kuliah Kimia Farmasi.

B. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang tersebut, masalah yang akan diselesaikan dalam penelitian ini adalah:

1. Bagaimana aktivitas metabolit sekunder dari *M. cordata* terhadap penghambatan protein Bcl-2 pada kanker payudara melalui uji secara *In silico*?
2. Bagaimana karakteristik farmakokinetik metabolit sekunder tumbuhan *M. cordata*?
3. Bagaimana toksisitas senyawa metabolit sekunder tumbuhan *M. cordata*?
4. Bagaimana desain video tutorial penggunaan *PyRx* 0.8 dalam *molecular docking* pada materi hubungan struktur dan aktivitas biologis senyawa mata kuliah Kimia Farmasi?

C. Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk:

1. mengkaji aktivitas senyawa metabolit sekunder *Mikania cordata* terhadap protein Bcl-2 melalui uji secara *In silico*.
2. mengkaji karakteristik farmakokinetik metabolit sekunder tumbuhan *M. cordata.*
3. mengidentifikasi toksisitas senyawa metabolit sekunder tumbuhan *M. cordata.*
4. mendesain video pembelajaran penggunaan *PyRx* 0.8 dalam *molecular docking* pada materi hubungan struktur dan aktivitas biologis senyawa mata kuliah Kimia Farmasi.

D. Manfaat Penelitian

Manfaat yang diharapkan dari penelitian ini adalah :

1. Membantu menambah pengetahuan terkait *molecular docking* sebagai tahapan untuk penemuan obat - obatan (*drugs discovery*).
2. Memberikan wawasan tentang potensi bahan alam sebagai obat – obatan.
3. Menjadi sumber pengetahuan bagi peneliti lainnya untuk melakukan penelitian terapi antikanker dari *M. cordata* lebih lanjut.
4. Menjadi bahan ajar tambahan terkait menggunakan software *PyRx* 0.8 dalam *molecular docking* pada materi hubungan struktur dan aktivitas biologis senyawa mata kuliah Kimia Farmasi.

E. Definisi Operasional

Definisi operasional merupakan gambaran utama yang menjadi batasan bagi peneliti, yang berfokus pada variabel atau konsep yang relevan dengan tujuan penelitian. Batasan–batasan tersebut adalah:

1. *Mikania cordata*

Mikania merupakan jenis tanaman yang termasuk ke dalam *family Asteraceae*. Spesies mikania yang memiliki karakter hampir sama yaitu *Mikania mikrantha kunth.* dan *Mikania cordata*. Tumbuhan ini tidak jarang ditemukan sebagai gulma yang tumbuh merambat di daerah curah hujan tinggi (Singh, 2022). Jenis *Mikania* yang dimaksud dalam penelitian ini adalah *M. cordata* (*Mikania cordata (Burm.f) B. Robinson*) atau dikenal dengan tumbuhan sembung rambat.

2. Metabolit Sekunder *M. cordata*

Metabolit sekunder merupakan senyawa-senyawa metabolik yang ada pada

tanaman sesuai dengan kebutuhan serta kemampuan organisme atau tanaman tersebut guna menghasilkan senyawa spesifik dengan peran yang beragam (Hersila et al., 2023). Metabolit sekunder yang dimaksud dalam penelitian ini adalah metabolit sekunder dari *M. cordata* yaitu seskuiterpen, dilakton, diterpen, alkaloid, flavonoid, saponin, dan steroid.

3. Protein Bcl-2 dalam Kanker Payudara

Kanker payudara adalah penyakit di mana pertumbuhan sel menjadi tidak normal atau tidak terkendali (Purwani et al., 2021). Dalam penelitian ini, peneliti menggunakan sel kanker payudara secara umum yang diketahui apoptosisnya terhambat oleh protein Bcl-2. Protein target yang digunakan pada penelitian ini, adalah protein Bcl2 (PDB ID: 4MAN) yang strukturnya diunduh pada website rscb.

4. Molecular Docking

Molecular docking merupakan metode secara *in silico* yang memprediksi orientasi terbaik ligan terhadap reseptor untuk membentuk kompleks yang stabil, serta menggunakan *electrostatic interaction,* dan *hydrogen bond* untuk mengkuantifikasinya (Chaudhary & Mishra, 2016). *Molecular docking* yang dimaksud dalam penelitian ini, yaitu metode komputasi yang dimanfaatkan untuk memprediksi interaksi antara protein Bcl-2 sebagai reseptor target dengan senyawa metabolit sekunder dalam *M. cordata* (ligan) menggunakan *software Chimera 1.16* sebagai alat preparasi protein Bcl-2 dengan metabolit sekunder yang terkandung dalam *M. cordata* beserta native ligan yaitu doxorubicin, *PyRx – Phyton prescription 0.8* sebagai *docking analyzer* serta *Discovery Studio Visualizer*

v21.1.0.20298 yang berperan membaca aktivitas senyawa metabolit sekunder *M. Cordata* sebagai penghambat Bcl-2 yang baik dibandingkan dengan doxorubicin, aktivitas tersebut dianalisis kembali menggunakan aturan Lipinski kemudian dianalisis lebih lanjut dengan prediksi ADME (Absorbsi, Distribusi, Metabolisme, Eliminasi) menggunakan *www.swissadme.ch/index.php* dan toksisitas dengan *https://tox.charite.de/protox3/*.

5. Video Tutorial

Dalam penelitian ini, video tutorial yang dimaksud adalah video yang berisi tentang tutorial menggunakan *PyRx* 0.8 untuk *Virtual Screening* Interaksi Ligan-Protein pada materi hubungan struktur dan aktivitas biologis senyawa kimia pada mata kuliah Kimia Farmasi. Video tutorial dalam penelitian ini dirancang lengkap dengan buku panduan yang bisa diakses baik secara daring maupun luring melalui google drive berisi file ligand dan protein yang siap digunakan, tahapan menggunakan software PyRx 0.8 secara tertulis, serta troubleshooting atau permasalahan umum yang sering dialami pengguna software PyRx 0.8. Video tutorial dirancang menggunakan perangkat lunak *Capcut Pro* V13.6.0 dan bantuan Canva Pro.

6. *Research and Development*

Research and Development (R&D) dalam penelitian ini merupakan metode penelitian yang digunakan untuk menghasilkan dan mengembangkan suatu produk pembelajaran melalui tahapan yang sistematis. Penelitian ini menggunakan model pengembangan ADDIE, yang dibatasi pada tahapan *analysis* dan *design*. Tahap *analysis* dilakukan untuk menganalisis kurikulum serta kebutuhan bahan ajar

tambahan pada mata kuliah Kimia Farmasi. Tahap *design* dilakukan untuk merancang produk pembelajaran berupa video tutorial virtual screening obat menggunakan software PyRx 0.8, yang dilengkapi dengan buku panduan tertulis berisi langkah penggunaan, *troubleshooting*, serta solusi terhadap permasalahan yang umum dialami pengguna.