

Studi Keamanan Bahan Kimia Obat dan Pangan Berbasis Software

Diar Herawati

Program Studi Farmasi FMIPA Universitas Islam Bandung

ABSTRAK

Kemajuan teknologi informasi yang disertai kemajuan kajian biologi molekuler memberikan banyak perkembangan di berbagai bidang, termasuk bidang farmasi. Farmasi sebagai bidang yang fokus pada kajian khasiat serta keamanan suatu bahan kimia, baik obat maupun pangan, memanfaatkan teknologi informasi untuk penelitian yang lebih akurat dan cepat. Sebelum pemanfaatan teknologi informasi, ahli farmasi melakukan pengujiannya secara *in vivo* (berbasis organisme) dan *in vitro* (berbasis kultur). Setelah teknologi informasi dimanfaatkan, pengujian bahan kimia dilakukan juga secara *in silico* (berbasis software). Pengujian keamanan bahan kimia secara *in silico* ini dilandaskan pada teori biologi molekuler yang menyatakan bahwa efek suatu bahan kimia terhadap tubuh disebabkan reaksi lock n key. Artinya ketika ada kecocokan antara struktur tiga dimensi bahan kimia obat/ pangan dengan struktur molekul biologis di dalam tubuh, maka akan muncul efek, baik efek menguntungkan maupun merugikan. Kecocokan struktur bahan kimia obat/pangan dengan molekul biologis dimaknai sebagai reaktivitas yang diukur berdasarkan besaran energi bebas Gibbs. Uji reaktivitas berdasar energi bebas Gibbs ini dilakukan dengan memodelkan struktur kimia obat/ pangan serta memodelkan struktur molekul biologis yang diduga menjadi target. Mayoritas model struktur molekul biologis yang telah ditemukan dapat diakses di berbagai bank data tak berbayar di dunia maya. Sementara untuk pengujian reaktivitas terdapat beberapa software pendukung yang berbayar maupun tak berbayar.

1. PENDAHULUAN

Pemanfaatan komputer memainkan peranan yang sangat penting dalam perkembangan ilmu dan teknologi. Ilmu dan perkembangan teknologi selalu membutuhkan pembuktian yang mengkaitkan antara eksperimen dan teori. Dalam eksperimen, sistem yang dipelajari diukur dengan peralatan eksperimen dan hasilnya dinyatakan dalam bentuk numerik. Sedangkan dalam teori, model suatu sistem pada umumnya disusun dalam bentuk persamaan matematika. Sehingga dari persamaan yang ada dapat dibuat prediksi terhadap hasil dari perubahan beberapa variabel.

Pada sistem yang kompleks seperti pada makhluk hidup, kajian eksperimen dan teori membutuhkan penyederhanaan masalah. Penyederhanaan kompleksitas ini dikenal dengan istilah pemodelan. Pada kajian terdahulu, model teoritis tidak dapat menjelaskan bentuk riil dari sistem biologis atau sistem kimia. Tetapi berkat kemajuan teknologi informasi yang disertai kemajuan kajian biologi molekuler serta perkembangan di berbagai bidang, termasuk bidang farmasi, hal ini menjadi mungkin untuk dilakukan. Farmasi sebagai bidang yang fokus pada kajian khasiat serta keamanan suatu bahan kimia, baik obat maupun pangan, memanfaatkan teknologi informasi untuk penelitian yang lebih akurat dan cepat.

Sebelum pemanfaatan teknologi informasi, ahli farmasi melakukan pengujiannya secara *in vivo* (berbasis organisme) dan *in vitro* (berbasis kultur). Setelah teknologi informasi dimanfaatkan, pengujian bahan kimia dilakukan juga secara *in silico* (berbasis software). Kajian komputasi berkembang sangat pesat sejak tahun 1950. Sehingga mulai dikenal eksperimen berbasis komputer pada sistem kimia. Untuk model eksperimen tetap didasarkan pada teori kimia termutakhir, sementara untuk perhitungannya memanfaatkan algoritma dalam bahasa pemrograman komputer.

Perkembangan eksperimen berbasis komputer mengubah hubungan tradisional antara teori dan eksperimen secara signifikan. Karena simulasi komputer membutuhkan suatu metoda yang akurat dalam memodelkan sistem yang dikaji. Sehingga sistem dimodelkan dalam kondisi yang semirip mungkin dengan aslinya. Jika hal ini terjadi, maka simulasi bersifat sebagai alat yang sangat berguna, bukan hanya untuk memahami dan menginterpretasi data eksperimen dalam tingkat mikroskopik, tetapi juga memungkinkan kajian pada kondisi yang tidak dapat dijangkau melalui eksperimen, seperti reaksi pada kondisi tekanan yang sangat tinggi atau reaksi yang melibatkan gas berbahaya.