

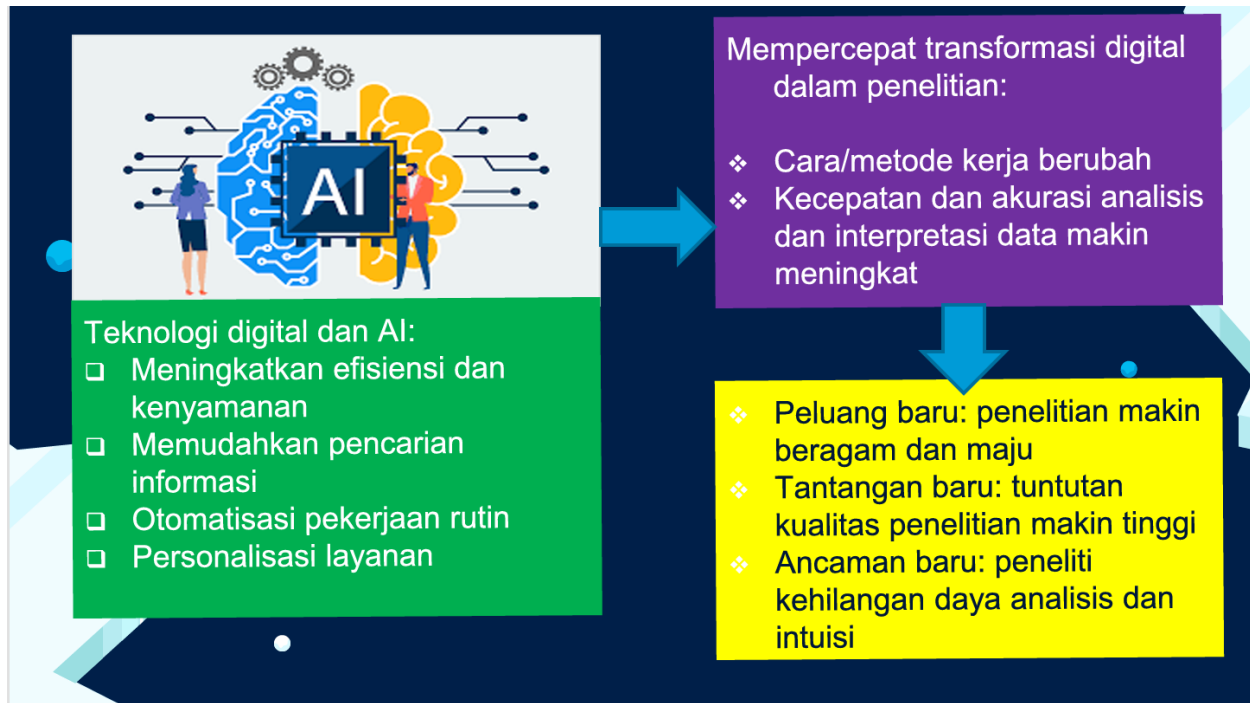
Seminar Nasional Pendidikan & Sains Kimia VIII
Prodi Pendidikan Kimia FKIP Undana
Kupang, 23 Mei 2025

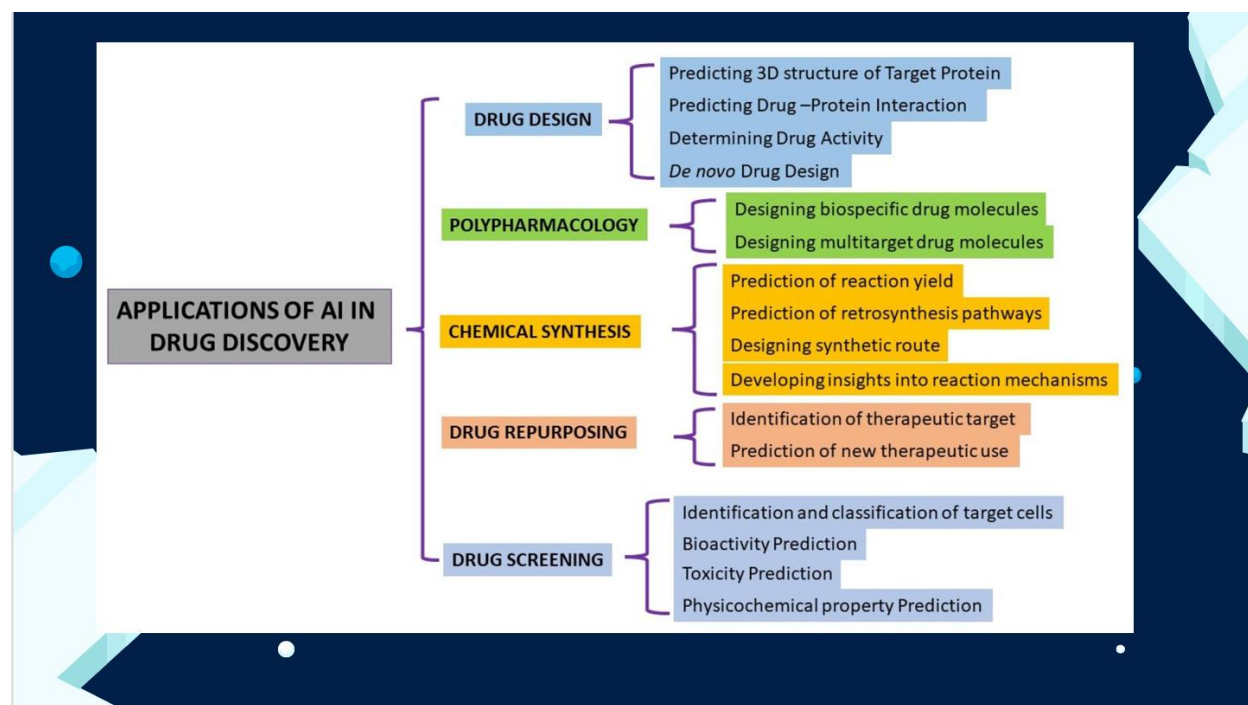
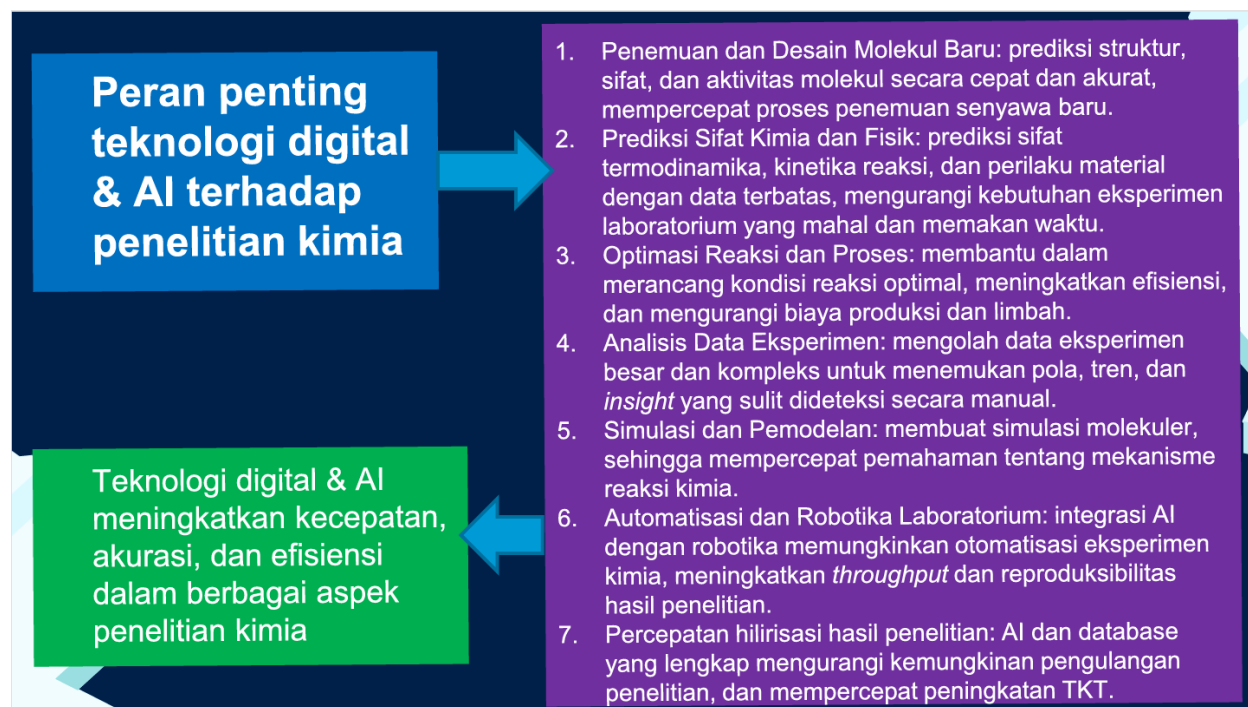
Pemanfaatan Teknologi Digital dan AI untuk Meningkatkan Keragaman dan Kualitas Penelitian Kimia

Maximus M.Taek

Teknologi Digital & AI

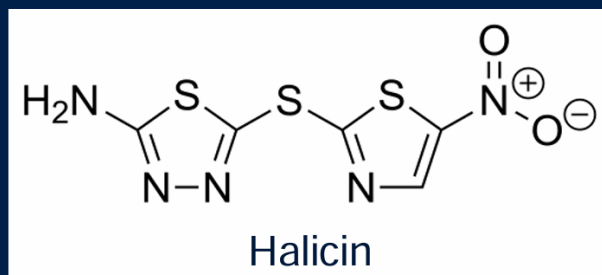
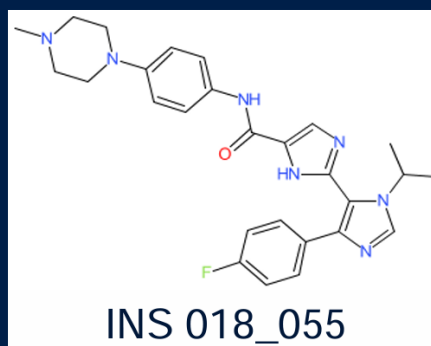
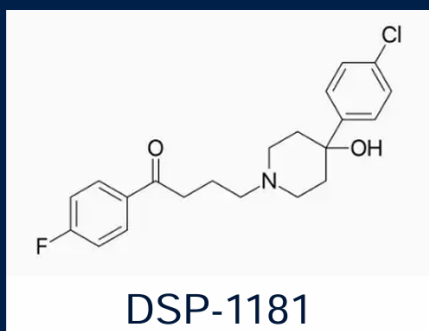
- ☐ Komputer
- ☐ Internet
- ☐ Software & Aplikasi
- ☐ Big Data & Cloud
- ☐ Database Digital
- ☐ Artificial Intelligence (AI)





Contoh obat baru dan senyawa kimia lain yang disintesis dengan bantuan teknologi digital dan AI

 Nama Senyawa / Obat	 Tujuan / Indikasi	 Kontribusi AI & Teknologi Digital	 Status / Keterangan
DSP-1181 (Exscientia)	Obsesif Kompulsif (OCD)	- AI merancang & optimasi molekul secara cepat - Simulasi properti & seleksi senyawa	Uji klinis (2020), waktu desain < 1 tahun
Halicin (MIT & IBM)	Antibiotik baru	- Deep learning identifikasi senyawa efektif - Prediksi mekanisme kerja baru	Efektif melawan bakteri resisten
INS018_055 (Insilico Medicine)	Fibrosis paru (IPF)	- AI menemukan target biologis baru - Merancang molekul & prediksi efikasi	Uji klinis Fase II (2024)
Elektrolit Li-ion (Toyota & Stanford)	Baterai lithium-metal	- AI skринing > 100.000 senyawa - Prediksi kestabilan & konduktivitas	Menghasilkan elektrolit lebih stabil
MOFs (Metal-Organic Frameworks)	Penyimpanan gas, katalis, pemisahan molekul	- AI merancang struktur MOF - Prediksi sifat pori & kestabilan	Digunakan dalam energi & lingkungan
Katalis Reduksi CO ₂	Energi bersih & pengurangan emisi	- Reinforcement learning desain katalis baru - Prediksi efisiensi & selektivitas	Diterapkan pada reaktor konversi CO ₂

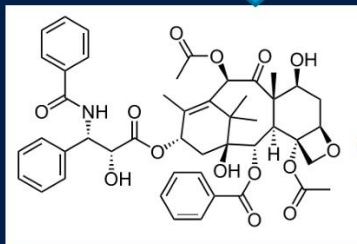


Teknologi Digital dan AI Meningkatkan Efisiensi Sintesis Senyawa Kimia



Taxus brevifolia
(Pacific Yew)

Sintesis konvensional: lebih dari 30 langkah, rendemen rendah dan biaya tinggi (Holton et al., 1994).



Taxol (Paclitaxel)

Bantuan AI: +- 10 langkah, rendemen lebih tinggi dan biaya lebih rendah (Gao et al., 2020)

AI membantu mengidentifikasi reaksi yang lebih langsung dan menghindari langkah-langkah yang tidak perlu, sehingga proses menjadi lebih cepat dan ekonomis.

Pentingnya *database* digital dalam mendukung penelitian kimia

1. Penyimpanan dan Pengelolaan Data yang Besar dan Kompleks: memungkinkan penyimpanan data secara terorganisir, memudahkan akses, pencarian, dan pengelolaan data secara efisien.
2. Meningkatkan Reproduksi dan Validitas Penelitian: data eksperimen dapat disimpan secara lengkap dan akurat, sehingga memudahkan peneliti lain untuk mereplikasi dan memverifikasi hasil penelitian.
3. Mendukung Analisis Data dan Pengembangan Model Prediktif: memungkinkan penggunaan teknik analisis data dan *machine learning* untuk menemukan pola, hubungan, dan prediksi baru.
4. Memfasilitasi Kolaborasi dan Pertukaran Data: *database* online memudahkan kolaborasi antar peneliti dari berbagai institusi dan negara.
5. Meminimalisasi pengulangan penelitian: *database* digital mencegah pengulangan penelitian yang tidak perlu karena ketidaktahuan.

Database Digital Membantu Mengurangi Pengulangan Penelitian



Grewia koordersiana, Burret.
Tetun : Lenok
Sumba : Lino

Homotypic Synonyms

Grewia celtidifolia var. *eriocarpa* (Juss.) Y.C.Hsu & R.Zhuge in Bot. J. South China 2: 19 (1993)

Heterotypic Synonyms

Grewia araria Wall. ex Burret in Notizbl. Bot. Gart. Berlin-Dahlem 9: 656 (1926)

Grewia asiatica var. *vestita* (Wall. ex Brandis) Mast. in J.D.Hooker, Fl. Brit. India 1: 387 (1874)

Grewia boehmeriifolia Kaneh. & Sasaki in Trans. Nat. Hist. Soc. Formosa 18: 332 (1928)

Grewia elastica Royle in Ill. Bot. Himal. Mts.: 104 (1834)

Grewia elatostemoides Collett & Hemsl. in J. Linn. Soc., Bot. 28: 27 (1890)

Grewia inaequalis Blume in Bijdr. Fl. Ned. Ind.: 115 (1825)

Grewia inaequalis var. *leptopetala* (T.Cooke) M.R.Almeida in Fl. Maharashtra 1: 186 (1996)

Grewia koordersiana Burret in Notizbl. Bot. Gart. Berlin-Dahlem 9: 662 (1926)

Grewia lantsangensis Hu in Bull. Fan Mem. Inst. Biol., Bot. 10: 134 (1940)

Grewia mesopoda Burret in Notizbl. Bot. Gart. Berlin-Dahlem 9: 663 (1926)

Grewia negrosensis Elmer in Leaf. Philipp. Bot. 2: 631 (1909)

Grewia tiliifolia var. *leptopetala* T.Cooke in Fl. Bombay: 142 (1901)

Grewia vestita Wall. ex Brandis in Forest Fl. N.W. India: 40 (1874)

Beberapa database digital pendukung penelitian kimia

1. Kimia Organik

Database yang mendukung penelitian reaksi dan senyawa organik:

Nama Database	Keterangan
Reaxys	Menyediakan informasi reaksi kimia organik, kondisi reaksi, katalis, dan data literatur dari jurnal serta paten.
SPRESI	Database reaksi kimia organik dan struktur senyawa dari literatur sejak 1974.
Organic Chemistry Portal	Berisi artikel terbaru, reaksi, dan informasi senyawa organik yang digunakan dalam sintesis modern.

2. Kimia Bahan Alam & Fitokimia

Database yang berfokus pada metabolit sekunder, senyawa dari tumbuhan, dan sumber alami lainnya:

Nama Database	Keterangan
NPASS (Natural Product Activity and Species Source Database)	Menyediakan data aktivitas senyawa alam dan sumber biologisnya.
NAPRALERT	Data etnofarmakologi, senyawa alam, dan aktivitas biologisnya (dikelola Univ. Illinois at Chicago).
Dr. Duke's Phytochemical and Ethnobotanical Databases	Kumpulan data fitokimia dari tanaman yang relevan dalam pengobatan tradisional.
UNPD (Universal Natural Products Database)	Berisi struktur 3D dan informasi lebih dari 200.000 senyawa alami.

3. Kimia Medisinal

Fokus pada desain dan aktivitas senyawa sebagai calon obat:

Nama Database	Keterangan
ChEMBL	Bioaktivitas senyawa kecil terhadap target biologis, sangat digunakan dalam penemuan obat.
PubChem BioAssay	Menyediakan data hasil uji biologis dari ribuan senyawa kimia.
BindingDB	Informasi ikatan senyawa terhadap target protein (enzim, reseptor, dll).
DrugBank	Informasi struktur, interaksi, mekanisme aksi, dan farmakokinetik obat.

4. Biokimia

Berisi data biomolekul seperti protein, enzim, metabolit:

Nama Database	Keterangan
KEGG (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes)	Peta metabolisme, jalur biokimia, dan interaksi enzimatik.
BRENDA	Informasi fungsi, kinetika, dan substrat enzim dari berbagai organisme.
UniProt	Database protein terbesar, dengan anotasi struktur dan fungsi.
HMDB (Human Metabolome Database)	Informasi kimia, biologi, dan klinis lebih dari 100.000 metabolit manusia.

5. Kimia Anorganik

Fokus pada struktur senyawa anorganik dan kompleks koordinasi:

Nama Database	Keterangan
ICSD (Inorganic Crystal Structure Database)	Informasi struktur kristal senyawa anorganik (lebih dari 200.000 data).
Cambridge Structural Database (CSD)	Walau dominan organik, juga mencakup kompleks logam dan senyawa anorganik.
Materials Project	Prediksi dan visualisasi struktur dan sifat material anorganik berdasarkan kalkulasi DFT.

6. Kimia Analitik

Database untuk spektroskopi, kromatografi, dan metode analisis:

Nama Database	Keterangan
NIST Chemistry WebBook	Data spektroskopi (IR, MS, UV-Vis), termodinamika, dan fisika molekul.
MassBank	Spektrum massa untuk identifikasi senyawa dalam metabolomik dan analisis lingkungan.
Spectral Database for Organic Compounds (SDBS)	Spektrum IR, NMR, MS dari ribuan senyawa organik.
TOXNET (arsip)	Dulu digunakan untuk toksikologi dan pencemaran kimia, sekarang datanya dialihkan ke PubChem dan lainnya.

7. Kimia Fisika

Berisi data sifat fisik-molekul, termodinamika, kinetika reaksi:

Nama Database	Keterangan
NIST Thermodynamics WebBook	Data entalpi, entropi, kapasitas panas, koefisien Henry, dll.
ChemSpider	Informasi kimia umum termasuk massa molekul, logP, polaritas, pKa, dll.
JANAF Thermochemical Tables	Data energi dan fungsi partisi senyawa gas dan padatan.
PES (Potential Energy Surface) Repositories	Untuk perhitungan teori struktur molekul & dinamika.

Contoh aplikasi (*software*) pendukung penelitian kimia

1. Kimia Organik

Nama Aplikasi	Fungsi Utama
ChemDraw	Menggambar struktur molekul organik dan reaksi kimia.
MarvinSketch	Desain struktur kimia, prediksi sifat logP, pKa, dan lainnya.
Gaussian	Perhitungan teori kuantum untuk struktur organik.
Reaction Mechanism Generator (RMG)	Simulasi otomatis reaksi kimia dan jalur mekanismenya.

2. Kimia Bahan Alam & Fitokimia

Nama Aplikasi	Fungsi Utama
MZmine	Analisis data LC-MS untuk metabolomik dan senyawa alam.
OpenChrom	Analisis data kromatografi GC-MS.
MetFrag	Identifikasi senyawa dari data spektrometri massa.
KNIME	Workflow visual untuk pengolahan data fitokimia dan bioaktivitas.

3. Kimia Medisinal

Nama Aplikasi	Fungsi Utama
Schrödinger Suite (Maestro, Glide)	Docking molekul, prediksi afinitas obat, QSAR modeling.
MOE (Molecular Operating Environment)	Pemodelan molekul dan farmakofoor.
AutoDock / AutoDock Vina	Molecular docking dan simulasi interaksi obat-target.
SwissADME (web)	Prediksi sifat farmakokinetik dan ADME senyawa kecil.

4. Biokimia

Nama Aplikasi	Fungsi Utama
PyMOL	Visualisasi struktur protein dan interaksi ligan.
BLAST (NCBI)	Analisis sekuens protein atau DNA untuk homolog.
Cytoscape	Visualisasi jaringan interaksi biomolekul.
GROMACS	Simulasi dinamika molekul (MD) untuk protein dan enzim.

⚙️ 5. Kimia Anorganik

Nama Aplikasi	Fungsi Utama
VESTA	Visualisasi struktur kristal dan data difraksi.
CrystalMaker	Pemodelan dan visualisasi struktur kristal 3D.
WIEN2k	Kalkulasi struktur elektronik material anorganik (DFT-based).
Materials Studio	Desain dan simulasi senyawa anorganik dan padatan.

🧪 6. Kimia Analitik

Nama Aplikasi	Fungsi Utama
OriginPro	Analisis statistik dan visualisasi data eksperimen.
LabSolutions (Shimadzu)	Pengolahan data dari spektrofotometer dan kromatografi.
Bruker TopSpin	Analisis dan pemrosesan data NMR.
Spectragryph	Analisis spektrum UV-Vis, IR, dan spektroskopi lainnya.

7. Kimia Fisika

Nama Aplikasi	Fungsi Utama
Gaussian / ORCA	Perhitungan teori kuantum (energi, geometri, spektrum).
Molpro	Perhitungan akurat untuk sistem multi-elektron.
CP2K	Simulasi struktur dan dinamika pada tingkat atom.
LAMMPS	Simulasi dinamika molekul untuk sistem besar (bulk, surface).

Tantangan yang Dihadapi Peneliti Kimia Akibat Perkembangan Teknologi Digital dan AI

Kompleksitas Data dan Analisis

- ❖ Penelitian kimia menghasilkan data yang sangat besar dan kompleks, seperti spektrum, struktur molekul, dan hasil eksperimen.
- ❖ Mengelola, menyimpan, dan menganalisis data ini memerlukan keahlian khusus dalam *big data* dan *machine learning*.
- ❖ Banyak peneliti kimia yang belum memiliki latar belakang kuat di bidang ini, sehingga menghadapi hambatan dalam mengintegrasikan AI secara efektif (Chen et al., 2020).

❑ Keterbatasan Data Berkualitas Tinggi

AI sangat bergantung pada data berkualitas tinggi dan beragam. Di bidang kimia, data eksperimen seringkali tidak lengkap, tidak konsisten, atau tidak terdokumentasi dengan baik, yang dapat mengurangi akurasi dan keandalan model AI (Butler et al., 2018).

❑ Kurangnya Infrastruktur dan Sumber Daya

Penggunaan teknologi digital dan AI membutuhkan infrastruktur TI yang canggih, termasuk *cloud*, perangkat lunak khusus, dan sumber daya manusia yang terampil. Banyak lembaga penelitian, terutama di negara berkembang, menghadapi kendala dalam hal ini (Jensen et al., 2021).

❑ Tantangan Etika dan Keamanan Data

Penggunaan *big data* dan AI menimbulkan isu etika terkait privasi, keamanan data, dan hak kekayaan intelektual. Peneliti harus memastikan bahwa data yang digunakan tidak melanggar hak cipta dan bahwa model AI tidak disalahgunakan (Vayena et al., 2018).

Ancaman yang Dihadapi Peneliti Kimia Akibat Perkembangan Teknologi Digital dan AI

❑ Penggantian Peran Manusia

AI dan otomatisasi dapat menggantikan beberapa fungsi tradisional peneliti, seperti analisis data dan simulasi, yang berpotensi mengurangi kebutuhan akan tenaga manusia dalam beberapa aspek penelitian kimia. Hal ini menimbulkan kekhawatiran tentang pengurangan lapangan kerja dan hilangnya keahlian tertentu (Huang & Rust, 2021).

❑ Ketergantungan Berlebihan pada Teknologi

Ketergantungan yang tinggi terhadap AI dapat menyebabkan peneliti kehilangan kemampuan analisis kritis dan intuisi ilmiah, yang merupakan aspek penting dalam inovasi kimia. Jika terlalu bergantung pada algoritma, risiko kesalahan atau bias dalam model dapat tidak terdeteksi (Gómez-Bombarelli et al., 2018).

❑ Risiko Bias dan Ketidakakuratan Model AI

Model AI yang dilatih dengan data yang tidak representatif dapat menghasilkan prediksi yang bias atau tidak akurat, yang berpotensi mengarah pada kesalahan dalam pengembangan bahan atau proses kimia (Sanchez-Lengeling et al., 2019).

Menjadi Peneliti Kimia yang Inovatif di Era Teknologi Digital dan AI

“Kuasai dan manfaatkan semaksimal mungkin *database* digital dan teknologi AI untuk membantu penelitian”

Belajar menyusun “*prompt*” yang:

- ☐ Benar
- ☐ Jelas
- ☐ Relevan
- ☐ Spesifik
- ☐ Lengkap
- ☐ Terperinci

Terima kasih