

## Pelatihan Simulasi Molecular Docking Metode PLANTS pada Mahasiswa Program Studi Kimia FMIPA Universitas Negeri Makassar

Rizal Irfandi<sup>1\*</sup>, Suriati Eka Putri<sup>1</sup>, Diana Eka Pratiwi<sup>1</sup>, Sumiati Side<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Program Studi Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Makassar

<sup>2</sup>Program Studi Pendidikan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Makassar

\*Corresponding Email: rizalirfandi043@gmail.com

### Artikel Info

Submisi:  
20 Mei 2025  
Penerimaan:  
31 Mei 2025  
Terbit:  
2 Juni 2025

### Keywords:

*Molecular Docking,  
Simulasi, PLANTS,  
Ligand, Protein Target*

### ABSTRAK

Pengabdian kepada masyarakat ini bertujuan untuk meningkatkan kapasitas dan kompetensi mahasiswa Program Studi Kimia FMIPA Universitas Negeri Makassar (UNM) dalam menggunakan perangkat lunak simulasi molecular docking, khususnya metode PLANTS (Protein-Ligand ANT System). Molecular docking merupakan salah satu pendekatan komputasi yang penting dalam bidang kimia medisinal dan desain obat, yang memungkinkan prediksi interaksi antara ligan dan reseptor protein. Dalam kegiatan ini, mahasiswa diberikan pelatihan intensif mengenai dasar-dasar teori docking, instalasi dan penggunaan software PLANTS, serta interpretasi hasil docking untuk mendukung penelitian atau tugas akhir mahasiswa program studi kimia. Hasil kegiatan menunjukkan bahwa mahasiswa mampu mengoperasikan software PLANTS secara mandiri dan memahami penerapannya dalam konteks penelitian kimia. Pelatihan ini diharapkan dapat menjadi fondasi keterampilan riset berbasis komputasi yang berguna dalam menunjang tugas akhir maupun penelitian lanjutan.

### Pendahuluan

Kemajuan teknologi komputasi telah membawa dampak signifikan dalam bidang kimia, terutama dalam studi interaksi molekuler melalui pendekatan *in silico*. Salah satu metode yang berkembang pesat adalah molecular docking, yang digunakan untuk memprediksi cara suatu molekul kecil (ligan) berikatan dengan target biologis, seperti protein. Teknik ini menjadi sangat penting dalam desain obat dan penemuan senyawa bioaktif.

Simulasi komputer telah menjadi metode riset penting dalam studi sifat fisik dan kimia berbagai jenis material karena perkembangan pesat informasi dan teknologi (Deng et al., 2018). Dalam program studi kimia, pemanfaatan simulasi komputer menawarkan cara yang ampuh untuk membantu mahasiswa

memvisualisasikan representasi kimia dan memahami konsep-konsep kimia yang kompleks (Tang & Abraham, 2015). Dengan memanfaatkan media digital, misalnya presentasi interaktif, mahasiswa dapat berinteraksi langsung dengan materi melalui visualisasi dinamis seperti gambar, grafik, dan animasi, sehingga membuat pembelajaran lebih menarik dan efektif (Alga et al., 2024). Simulasi memungkinkan para ilmuwan untuk memanipulasi variabel dan mengamati efeknya pada sistem molekuler dengan cara yang tidak mungkin dilakukan dalam eksperimen laboratorium tradisional. Oleh karena itu, pemahaman tentang prinsip-prinsip simulasi dan keterampilan dalam menggunakan perangkat lunak bioinformatika menjadi sangat penting bagi mahasiswa kimia. Selain

itu, simulasi *in silico* memberikan dampak positif pada retensi informasi dan pemahaman konsep-konsep fundamental mahasiswa (Silva et al., 2022).

Integrasi media pembelajaran digital dalam pengajaran meningkatkan hasil belajar dan mempersiapkan mahasiswa untuk tantangan di dunia yang semakin terhubung secara digital (Alga et al., 2024). Pelatihan *molecular docking* memberikan pemahaman mendalam tentang interaksi obat-target dan prinsip-prinsip desain obat berbasis struktur. Dengan mengembangkan keterampilan ini, mahasiswa kimia akan lebih siap untuk melakukan penelitian inovatif dan berkontribusi pada pengembangan obat-obatan baru dan terapi yang lebih efektif. Selain itu, integrasi teknologi digital dalam kurikulum program studi kimia menciptakan lingkungan belajar yang lebih dinamis, interaktif, dan relevan (Alga et al., 2024). Penggunaan alat-alat teknologi ini meningkatkan kualitas proses belajar mengajar dengan meningkatkan tingkat interaksi, komunikasi, dan kolaborasi (Hidayat & Khotimah, 2019).

Namun, keterbatasan akses terhadap pelatihan dan bimbingan langsung menyebabkan banyak mahasiswa kesulitan dalam mengaplikasikan metode ini secara efektif dalam penelitian. Oleh karena itu, kegiatan pengabdian ini dirancang untuk memberikan pelatihan dasar penggunaan perangkat lunak PLANTS, yang merupakan salah satu tools open-source yang banyak digunakan dalam *molecular docking*. Melalui pelatihan ini, diharapkan mahasiswa memiliki keterampilan dasar dalam menggunakan PLANTS untuk mendukung penelitian mahasiswa di bidang kimia. Program Merdeka Belajar mempromosikan integrasi teknologi ke dalam pembelajaran untuk mengembangkan pendidikan yang relevan dengan kebutuhan mahasiswa dan tren teknologi saat ini. Pelatihan ini juga bertujuan untuk meningkatkan pemahaman mahasiswa tentang pemanfaatan teknologi komputasi dalam penelitian kimia, khususnya dalam studi interaksi molekuler.

Dengan menggunakan TIK, suatu proses dan kegiatan dapat dilakukan dengan cepat, mudah dan efisien. Pelatihan ini juga menyoroti pentingnya pembelajaran berbasis teknologi informasi dan komunikasi, yang telah menjadi bagian tak terpisahkan dari pendidikan modern (Asfiana et al., 2024). Oleh karena itu, pengabdian kepada masyarakat ini akan memberikan kontribusi positif dalam meningkatkan kualitas penelitian dan inovasi di bidang kimia, serta mempersiapkan mahasiswa untuk menghadapi tantangan di era digital. Kegiatan pengabdian ini dilaksanakan melalui pendekatan pelatihan interaktif dan praktik langsung, dengan harapan memberikan dampak positif bagi peningkatan kompetensi mahasiswa kimia dalam pemanfaatan teknologi komputasi untuk penelitian (Dewi et al., 2022; Wicaksono et al., 2024).

## Metode

Kegiatan pengabdian ini dilaksanakan dalam bentuk pelatihan tatap muka selama satu hari. Metode pelaksanaan terdiri dari:

1. Pemaparan teori dasar mengenai *molecular docking*, prinsip kerja metode PLANTS, dan pemilihan target-ligan.
2. Praktik langsung instalasi software Yasara, PLANTS, persiapan file input (protein target, *ref\_ligand* dan ligand), dan proses docking.
3. Analisis hasil docking meliputi skor docking, mode ikatan, dan visualisasi interaksi antara ligand dan *ref\_ligand* dengan protein target menggunakan software pendukung seperti Discovery Studio, dan Chimera.
4. Diskusi dan tanya jawab untuk mengevaluasi pemahaman dan menyelesaikan kendala teknis.

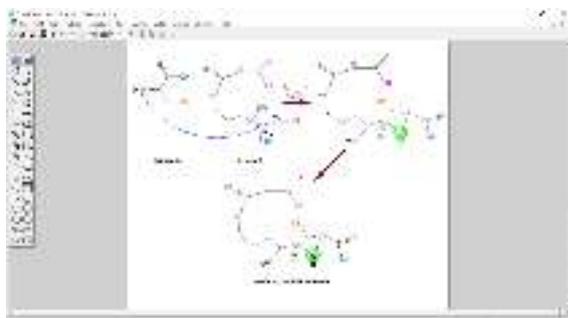
Peserta pelatihan adalah mahasiswa tingkat akhir PS Kimia FMIPA UNM yang sedang atau akan melakukan penelitian tugas akhir di bidang kimia anorganik, kimia organik, kimia farmasi, dan kimia komputasi.

Beberapa software yang digunakan dalam pelatihan ini, sebagai berikut:

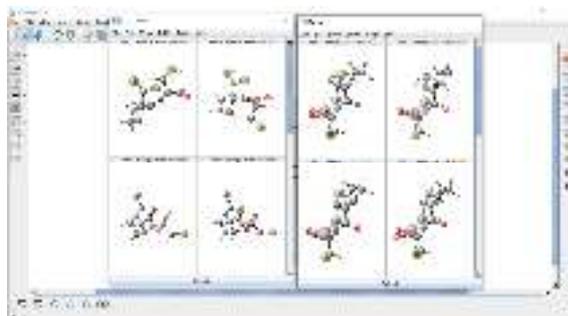


O. Korb, T. Stütze, T.E. Exner

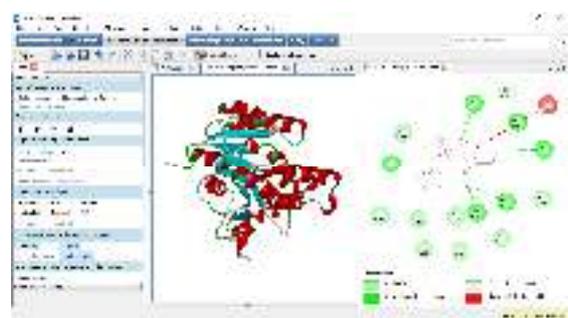
Gambar 1. Software PLANTS



Gambar 2. Software ChemDraw



Gambar 3. Software MarvinSketch



Gambar 4. Software Discover Studio Visualizer

### Hasil dan Pembahasan

Sebanyak 25 mahasiswa mengikuti kegiatan pelatihan. Hasil evaluasi

menunjukkan bahwa 88% peserta berhasil menyelesaikan simulasi docking dengan baik dan mampu menginterpretasikan hasilnya. Dokumentasi kegiatan pengabdian ditunjukkan pada **Gambar 1**.

Poin-poin keberhasilan pelatihan antara lain:

- Mahasiswa memahami peran *molecular docking* dalam skrining senyawa aktif.
- Peserta mampu mengidentifikasi residu aktif dalam situs pengikatan protein.
- Mahasiswa dapat menggunakan PLANTS dan software pendukung untuk menganalisis hasil docking.

Kendala yang dihadapi meliputi:

- Kesulitan awal dalam instalasi dan penggunaan software.
- Keterbatasan spesifikasi komputer dalam menjalankan simulasi molecular docking.

Diskusi kelompok dan pendampingan individual terbukti efektif dalam mengatasi kendala tersebut. Pelatihan ini membuka wawasan baru bagi mahasiswa terhadap metode riset modern berbasis komputasi. Selain memberikan pelatihan teknis, kegiatan ini juga memberikan pemahaman tentang pentingnya etika dalam pemanfaatan teknologi komputasi untuk penelitian. Hal ini mencakup isu-isu seperti plagiarisme, hak kekayaan intelektual, dan tanggung jawab dalam penggunaan data ilmiah. Selain itu, peserta pelatihan juga diberikan pemahaman mengenai pentingnya validasi hasil simulasi dengan data eksperimen, serta interpretasi hasil docking secara hati-hati dan kritis. Kegiatan pengabdian ini juga menyoroti pentingnya kerjasama antara akademisi dan industri dalam mengembangkan metode komputasi yang lebih canggih dan aplikatif. Pelatihan ini secara signifikan meningkatkan pemahaman peserta tentang pentingnya penguasaan teknologi informasi dan komputer saat ini. Setelah pelatihan, para peserta mengungkapkan peningkatan kepercayaan diri dan minat yang lebih besar untuk menggunakan metode molecular docking dalam penelitian di masa depan.

Peningkatan pengetahuan dan evaluasi Kegiatan pelatihan mengungkapkan bahwa

kebanyakan peserta merasa telah menambah pengetahuan dan keterampilan mereka. Partisipasi aktif sangat penting untuk meningkatkan minat, dan penelitian menunjukkan bahwa keterlibatan mahasiswa dalam kegiatan dapat meningkatkan prestasi akademik. Kegiatan pelatihan yang terstruktur dengan baik dan interaktif sangat penting untuk memastikan bahwa peserta tidak hanya memperoleh pengetahuan teoretis, tetapi juga keterampilan praktis yang dapat diterapkan dalam penelitian mereka.



**Gambar 5.** Dokumentasi Kegiatan Pengabdian Pelatihan Simulasi Molecular Docking

## Kesimpulan

Pelatihan molecular docking dengan metode PLANTS memberikan kontribusi positif dalam meningkatkan kompetensi mahasiswa PS Kimia FMIPA UNM. Mahasiswa memperoleh pemahaman konseptual dan keterampilan teknis yang dapat langsung diaplikasikan dalam penelitian kimia. Diharapkan kegiatan ini dapat berkelanjutan dengan modul lanjutan dan integrasi ke dalam kurikulum praktikum atau seminar penelitian.

## Daftar Pustaka

Adila, S., & Rodiyah, I. (2024). Memajukan Pendidikan Melalui Program Digitalisasi yang Efektif di Indonesia. *Indonesian Journal of Public*

*Administration Review*, 1(3), 16. <https://doi.org/10.47134/par.v1i3.2524>

- Alga, R. K., Hsb, A. A. A., Azhara, S., Hakim, E. H., Afia, N., & Yusnaldi, E. (2024). Pemanfaatan Media Pembelajaran Digital: Meningkatkan Minat Belajar IPS di Sekolah Dasar Melalui Presentasi Interaktif dan Video Animasi. *Continuous Education Journal of Science and Research*, 5(3), 200. <https://doi.org/10.51178/ce.v5i3.2197>
- Asfiana, A., Fitriyani, F., & Rokhimawan, M. A. (2024). Analisis Tantangan dan Kelebihan Pembelajaran Berbasis Teknologi Informasi dan Komunikasi pada Kurikulum Merdeka di Sekolah Dasar. *Ideguru Jurnal Karya Ilmiah Guru*, 10(1), 187. <https://doi.org/10.51169/ideguru.v10i1.1215>
- Deng, X., Yang, Y., Ma, Y., Sun, X., Zhou, G., Wu, H., & Lu, G. (2018). Self-assembled structure of sulfonic gemini surfactant solution. *AIP Advances*, 8(7). <https://doi.org/10.1063/1.5040684>
- Dewi, A. K., Tohaningrum, A., & Maylenasari, N. M. W. (2022). Pelatihan Pembuatan Video Animasi Pembelajaran Menggunakan Microsoft Powerpoint Pada Rumah Baca Asmanadia Sumbang. *TRIDARMA Pengabdian Kepada Masyarakat (PkM)*, 5(1), 62. <https://doi.org/10.35335/abdimas.v5i1.1885>
- Hidayat, N., & Khotimah, H. (2019). Pemanfaatan Teknologi Digital Dalam Kegiatan Pembelajaran. *Jurnal Pendidikan Dan Pengajaran Guru Sekolah Dasar (JPPGuseda)*, 2(1), 10. <https://doi.org/10.33751/jppguseda.v2i1.988>
- Nirfayanti, N., Rahmawati, R., & Setyawan, D. (2025). Peningkatan Kualitas Pembelajaran melalui Pelatihan Pemanfaatan Aplikasi Quizwhizzer pada Guru Sekolah Dasar. *Pengabdian*

- Masyarakat Sumber Daya Unggul,  
3(1), 14.  
<https://doi.org/10.37985/pmsdu.v3i1.1025>
- Silva, D. A., Cor, M. K., Lavasanifar, A., Davies, N. M., & Löbenberg, R. (2022). Using GastroPlus to teach complex biopharmaceutical concepts. *Pharmacy Education*, 22(1), 336. <https://doi.org/10.46542/pe.2022.221.336347>
- Tang, H., & Abraham, M. R. (2015). Effect of Computer Simulations at the Particulate and Macroscopic Levels on Students' Understanding of the Particulate Nature of Matter. *Journal of Chemical Education*, 93(1), 31. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.5b00599>
- Wicaksono, V. D., Paksi, H. P., Wijoyanto, D., Puspita, A. M. I., & Wardani, H. K. (2024). Pelatihan Pengembangan Gamifikasi Pembelajaran Untuk Penguatan Kegiatan Keototongroyongan Kolaboratif.