



Biomaterial Laut Berbasis Kimia Komputasi untuk Nanoteknologi Hijau: Literature Review

Annisha Noor Dienna^{a*}, Annisa Ananda^a, Ratri Mauluti Larasati^b

^aProgram Studi Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung, Kota Bandar Lampung, Lampung, 35145, Indonesia

^bFakultas Kedokteran, Universitas Lampung, Kota Bandar Lampung, Lampung, 35145, Indonesia

*Korespondensi penulis: annishandienna@fmipa.unila.ac.id (Annisha ND) Tel.: +682279386166

Sorotan

- Pengembangan biomaterial laut berbasis *computational chemistry* mendukung inovasi material *biodegradable* dan *biokompatibel* untuk aplikasi berkelanjutan.
- Integrasi *molecular docking*, *molecular dynamics*, dan *nanotechnology* mempercepat analisis bioaktivitas biomaterial laut modern
- *Marine biomaterials* berpotensi dikembangkan sebagai *smart biomaterials* dan *green nanotechnology* berbasis sumber daya laut terbarukan.

INFO ARTIKEL

Riwayat artikel:

Diajukan pada Mei 2026

Direvisi pada Mei 2026

Disetujui pada Juni 2026

Tersedia daring pada Juli 2026

Kata kunci:

Biomaterial Laut, Computational Chemistry, Sustainable Biomaterials

Keywords:

Marine Biomaterials, Computational Chemistry, Sustainable Biomaterials

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan menganalisis perkembangan biomaterial laut berkelanjutan berbasis pendekatan *computational chemistry* melalui metode *literature review* deskriptif-kualitatif. Kajian dilakukan terhadap 21 artikel jurnal internasional tahun 2021–2026 yang membahas *marine biomaterials*, *molecular docking*, *molecular dynamics simulation*, *nanotechnology*, dan *sustainable biomaterials*. Hasil penelitian menunjukkan bahwa biomaterial laut seperti *alginate*, *fucoidan*, *chitosan*, *carrageenan*, *marine collagen*, *phlorotannins*, dan *marine peptides* memiliki potensi tinggi sebagai *sustainable biomaterials* karena bersifat *biodegradable*, *biokompatibel*, *bioaktif*, dan mendukung *green material technology*. *Molecular docking* menjadi pendekatan komputasi paling dominan untuk memprediksi *binding affinity*, *molecular interaction*, dan bioaktivitas biomaterial terhadap target biologis, sedangkan *molecular dynamics simulation* digunakan untuk mengevaluasi stabilitas kompleks biomaterial protein dan sifat mekanik biomaterial pada tingkat atomistik dan *nanoscale*. Selain itu, integrasi biomaterial laut dengan *green nanotechnology* dan *computational modeling* menunjukkan potensi besar dalam pengembangan *hydrogel*, *scaffold*, *nanocarrier*, *biosensor*, dan *smart biomaterials* berbasis sumber daya laut terbarukan. Penelitian ini juga mengidentifikasi *research gap* berupa keterbatasan validasi biologis, standarisasi biomaterial laut, dan minimnya integrasi *AI-based biomaterials design*. Dengan demikian, *computational marine biomaterials* berbasis *sustainability* berpotensi menjadi *frontier research* yang mengintegrasikan *chemistry*, *nanotechnology*, *biotechnology*, dan *green material engineering modern*.

A B S T R A C T

This study aims to analyze the development of sustainable marine biomaterials based on computational chemistry approaches through a descriptive-qualitative literature review. The review was conducted on 21 international journal articles published between 2021–2026 discussing marine biomaterials, molecular docking, molecular dynamics simulation, nanotechnology, and sustainable biomaterials. The findings indicate that marine biomaterials such as alginate, fucoidan, chitosan, carrageenan, marine collagen, phlorotannins, and marine peptides possess high potential as sustainable biomaterials due to their biodegradable, biocompatible, and bioactive properties that support green material technology. Molecular docking was identified as the most dominant computational approach for predicting binding affinity, molecular interactions, and biomaterial bioactivity toward biological targets, while molecular dynamics simulation was applied to evaluate biomaterial protein complex stability and biomaterial mechanical properties at atomistic and nanoscale levels. Furthermore, the integration of marine biomaterials with green nanotechnology and computational modeling demonstrates significant potential for the development of hydrogels, scaffolds, nanocarriers, biosensors, and smart biomaterials derived from renewable marine resources. This study also identifies several research gaps, including limited biological validation, lack of marine biomaterial standardization, and limited integration of AI-based biomaterials design. Therefore, sustainability-based computational marine biomaterials have strong potential to become a frontier research area integrating chemistry, nanotechnology, biotechnology, and modern green material engineering.

1. Pendahuluan

Perkembangan penelitian biomaterial laut berkelanjutan berbasis pendekatan komputasi mengalami peningkatan seiring meningkatnya kebutuhan terhadap material yang *biodegradable*, biokompatibel, ramah lingkungan, dan mendukung *sustainability*. Lingkungan laut menghasilkan berbagai biomaterial unik seperti *fucoidan*, *alginate*, *chitosan*, *carrageenan*, *marine collagen*, *phlorotannin*, dan *marine peptides* yang potensial dikembangkan sebagai *hydrogel*, *scaffold*, *nanocarrier*, dan *smart biomaterials* karena memiliki aktivitas antioksidan, antiinflamasi, antimikroba, dan regeneratif yang tinggi [1-4]. Selain itu, integrasi biomaterial laut dengan *green technology* dan *circular bioeconomy* semakin memperkuat pengembangan *sustainable functional materials* berbasis sumber daya laut terbarukan [5-7]. Dalam perkembangannya, *computational chemistry* mulai berperan penting melalui *molecular docking*, *molecular dynamics simulation*, *ADMET prediction*, *machine learning*, dan *computational modeling* untuk memahami hubungan struktur, bioaktivitas, dan molecular interaction biomaterial secara lebih cepat dan efisien dibandingkan metode eksperimental konvensional [8, 9].

Berbagai penelitian menunjukkan bahwa integrasi *marine biomaterials* dan *computational chemistry* berkembang menuju pendekatan multidisiplin berbasis *nanotechnology*, *molecular interaction analysis*, dan *sustainable materials science*. *Molecular docking* dan *molecular dynamics*

simulation telah digunakan untuk mengevaluasi *marine-derived phlorotannins*, *marine polysaccharides*, *marine peptides*, dan *marine collagen* melalui analisis *binding affinity*, stabilitas kompleks, serta prediksi bioaktivitas biomaterial terhadap target biologis [10-12]. Selain itu, integrasi *nanotechnology* dan *marine biomaterials* juga mendukung pengembangan *hydrogel*, *scaffold*, dan *nanocarrier* dengan *targeted interaction* yang lebih baik [5]. Namun, sebagian besar penelitian masih terfokus pada karakterisasi eksperimental dan belum mengintegrasikan pendekatan *computational biomaterials* secara multidisiplin. Integrasi *computational interaction analysis* pada *sustainable marine biomaterials* juga masih relatif terbatas, terutama pada penggunaan *machine learning*, *AI-based biomaterials design*, dan *multiscale computational modeling* [8].

Berdasarkan kondisi tersebut, belum terdapat *literature review* yang secara khusus mengintegrasikan *marine biomaterials*, *computational chemistry*, *sustainability*, dan *green material technology* dalam satu kajian komprehensif. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan menganalisis perkembangan pendekatan komputasi seperti *molecular docking* dan *molecular dynamics simulation* dalam penelitian biomaterial laut berkelanjutan, mengidentifikasi biomaterial laut dominan dan hubungan struktur-bioaktivitasnya, serta memetakan *research trend*, *research gap*, dan arah *future research* pada *sustainable marine biomaterials* berbasis sumber daya laut. Dengan demikian, penelitian ini diharapkan dapat memberikan kontribusi teoritis terhadap pengembangan *computational marine biomaterials* berbasis *sustainability* dan teknologi *green material modern*.

2. Metode

Penelitian ini menggunakan metode *literature review* dengan pendekatan deskriptif-kualitatif untuk menganalisis perkembangan biomaterial laut berkelanjutan berbasis pendekatan komputasi. Penelitian dilakukan melalui tahap identifikasi, seleksi, evaluasi, dan sintesis literatur ilmiah yang berkaitan dengan *marine biomaterials*, *computational chemistry*, *molecular docking*, *molecular dynamics simulation*, *ADMET prediction*, *machine learning*, *nanotechnology*, dan *sustainable biomaterials*. Sampel penelitian berupa 21 artikel jurnal internasional tahun 2021–2026 yang membahas biomaterial laut, biomaterial berbasis polisakarida laut, *hydrogel sistem*, *marine-derived nanoparticles*, dan *green biomaterials*. Artikel yang dianalisis mencakup penelitian *review*, *experimental research*, *computational studies*, dan *multidisciplinary biomaterial studies* mengenai *fucoidan*, *alginate*, *chitosan*, *collagen laut*, *marine peptides*, *phlorotannins*, *cellulose biopolymers*, dan *marine nanobiomaterials*.

Instrumen penelitian berupa lembar sintesis literatur untuk mengelompokkan data berdasarkan jenis biomaterial, pendekatan komputasi, metode penelitian, hasil penelitian, *research gap*, keterbatasan, dan *future research*. Pengumpulan data dilakukan melalui pembacaan mendalam dan ekstraksi data terkait hubungan antara *marine biomaterials*, *sustainability*, dan *computational molecular interaction*. Data dianalisis menggunakan metode deskriptif kualitatif dan

sintesis naratif untuk membandingkan perkembangan penelitian, hubungan struktur–fungsi biomaterial, *molecular interaction* terhadap target biologis, serta *research trend* dan *research gap* pada *computational marine biomaterials modern*. Pendekatan ini digunakan untuk menghasilkan pemahaman sistematis mengenai perkembangan *sustainable marine biomaterials* berbasis komputasi dan arah pengembangan *future research* pada *green material technology*.

3. Hasil Dan Pembahasan

3.1. Perkembangan Marine Biomaterials Berkelanjutan

Data perkembangan *marine biomaterials* berkelanjutan dapat dilihat pada Tabel 1.

Tabel 1. Perkembangan *Marine Biomaterials* Berkelanjutan

No	Jenis Biomaterial Laut	Karakteristik Utama	Aplikasi Biomaterial	Temuan Hasil Penelitian	Referensi
1	Alginate	Biodegradable, biokompatibel, mudah membentuk hydrogel	Hydrogel, scaffold, wound healing, drug delivery	Alginate efektif meningkatkan regenerasi jaringan dan controlled drug release	[1], [2]
2	Fucoidan	Bioaktif, antioksidan, antiinflamasi	Drug delivery, tissue engineering, regenerative medicine	Fucoidan menunjukkan bioaktivitas tinggi dan mendukung sustainable biomaterials	[2], [11]
3	Chitosan	Low toxicity, biodegradable, antibakteri	Wound healing, scaffold, hydrogel, nanocarrier	Chitosan memiliki biokompatibilitas tinggi dan efektif untuk biomaterial regeneratif	[1], [13]
4	Marine Collagen	Regeneratif, low immunogenicity	Tissue engineering, regenerative therapy	Marine collagen efektif mendukung regenerasi jaringan dan implant biomaterial	[6], [13]
5	Carrageenan	Stabilitas fisiokimia baik, mudah dimodifikasi	Hydrogel, scaffold biomaterial	Carrageenan memiliki kemampuan pembentukan biomaterial yang stabil	[2]
6	Agarose	Biokompatibel dan biodegradable	Hydrogel systems dan tissue scaffold	Agarose efektif digunakan pada sistem biomaterial berbasis hidrogel	[2]
7	Marine Peptides	Aktivitas antioksidan tinggi dan self-assembly	Wound healing dan regenerative biomaterials	Marine peptides meningkatkan proliferasi sel, angiogenesis, dan regenerasi jaringan	[11]
8	Phlorotannins	Multi-target bioactivity dan ramah lingkungan	Antimicrobial biomaterials	Phlorotannins memiliki binding affinity tinggi terhadap protein target bakteri	[5]
9	Marine Polysaccharides	Mudah membentuk scaffold dan hydrogel	Smart biomaterials dan nanomaterials	Polisakarida laut mendominasi biomaterial modern karena stabilitas dan bioaktivitasnya	[14]
10	Marine Nanobiomaterials	Targeted delivery dan stabilitas tinggi	Green nanomaterials dan biosensor	Integrasi nanoteknologi meningkatkan bioavailability dan targeted delivery biomaterial laut	[14]

Berdasarkan Tabel 1 dapat dilihat bahwa biomaterial laut yang paling dominan dikembangkan dalam penelitian modern meliputi *alginate*, *fucoidan*, *chitosan*, *marine collagen*, *carrageenan*, *agarose*, *marine peptides*, dan *phlorotannins* karena memiliki sifat *biodegradable*, biokompatibel, dan bioaktif yang mendukung pengembangan *sustainable biomaterials*. Penelitian yang dianalisis menunjukkan bahwa biomaterial laut didominasi oleh polisakarida laut seperti

alginate, *fucoidan*, *chitosan*, *carrageenan*, dan *agarose* karena memiliki kemampuan membentuk *hydrogel*, *scaffold*, dan sistem penghantaran obat yang stabil untuk aplikasi *wound healing*, *tissue engineering*, dan *controlled drug* [1, 2, 14, 15]. Selain itu, *marine peptides*, collagen laut, dan *phlorotannins* menunjukkan bioaktivitas tinggi berupa aktivitas antioksidan, regeneratif, antiinflamasi, dan *antimicrobial* sehingga potensial dikembangkan sebagai *sustainable biomaterials* untuk *regenerative systems*, *drug delivery*, dan *green nanotechnology* [10, 11]. Integrasi nanoteknologi mampu meningkatkan *bioavailability*, *stability*, dan *targeted delivery marine biomaterials* sehingga memperluas pengembangan *smart biomaterials* berbasis sumber daya laut [11]. Sementara itu, *marine collagen* dan *marine peptides* diketahui memiliki kemampuan regeneratif tinggi yang mendukung *regenerative medicine* dan biomaterial fungsional berbasis *marine resources* [16]. Hasil analisis dari literatur review juga menunjukkan bahwa biomaterial laut mulai dikembangkan sebagai alternatif biomaterial sintesis karena lebih mendukung konsep *circular economy*, *green chemistry*, dan *sustainable material engineering* berbasis sumber daya terbarukan.

Tabel 2. Karakteristik Struktur dan Performa Polisakarida Laut pada Biomaterial Modern

No	Jenis Polisakarida Laut	Gugus/Fitur Struktur Dominan	Performa Biomaterial	Parameter Hasil Penelitian	Referensi
1	<i>Fucoidan</i>	Gugus sulfat dan hidroksil	Aktivitas bioaktif dan stabilitas scaffold	Menunjukkan bioaktivitas tinggi dan kemampuan scaffold yang baik	[17]
2	<i>Alginate</i>	Gugus karboksilat dan hidroksil	Pembentukan hydrogel stabil	Efektif membentuk jaringan hydrogel dan controlled release system	[2]
3	<i>Chitosan</i>	Gugus amino dan hidroksil	Biokompatibilitas dan toksisitas rendah	Efektif untuk wound dressing dan drug carrier	[18]
4	<i>Carrageenan</i>	Gugus sulfat polisakarida	Stabilitas jaringan biomaterial	Memiliki scaffold properties yang baik	[17]
5	<i>Agarose</i>	Struktur gel polisakarida	Kemampuan gel-forming tinggi	Digunakan sebagai hydrogel dan tissue scaffold	[17]
6	<i>Polisakarida Laminaria japonica</i>	Gugus hidroksil dan asam uronat	Swelling dan hemostatic properties	Swelling ratio mencapai ± 14 kali berat awal	[5]

Berdasarkan Tabel 2, *fucoidan*, *alginate*, *chitosan*, *carrageenan*, dan *agarose* menjadi polisakarida laut yang paling dominan dikembangkan dalam biomaterial modern karena memiliki gugus fungsi aktif seperti hidroksil, karboksilat, sulfat, dan amino yang berperan dalam pembentukan jaringan biomaterial stabil dan multifungsi. *Fucoidan*, *alginate*, *agarose*, dan *carrageenan* diketahui memiliki *scaffold properties* dan bioaktivitas tinggi sehingga efektif digunakan pada *hydrogel system*, *tissue engineering*, dan *regenerative biomaterials* [17]. Selain itu, *alginate* mampu membentuk jaringan hydrogel stabil melalui interaksi gugus karboksilat dan hidroksilat yang mendukung *controlled release system biomaterial* [2]. Chitin dan chitosan juga memiliki toksisitas rendah serta kompatibilitas biologis tinggi sehingga efektif digunakan sebagai *wound dressing* dan *drug carrier* melalui interaksi gugus amino terhadap sistem biologis

[18]. Hydrogel berbasis *Laminaria japonica* menunjukkan swelling ratio hingga ± 14 kali berat awal serta meningkatkan kemampuan koagulasi darah pada sistem hidrogel [5]. Selain itu, peningkatan *Young's modulus* setelah penambahan polisakarida menunjukkan bahwa interaksi *hydrogen bonding* dan *crosslinking* berkontribusi terhadap peningkatan stabilitas mekanik biomaterial secara signifikan [5]. Keberadaan gugus sulfat pada *fucoidan* dan *carrageenan* juga berperan dalam meningkatkan bioaktivitas, kemampuan *scaffold formation*, dan stabilitas biomaterial berbasis polisakarida laut [17]. Dengan demikian, hubungan antara struktur gugus fungsi, interaksi molekuler, dan performa biomaterial menjadi faktor utama yang mendukung dominasi polisakarida laut dalam pengembangan *sustainable marine biomaterials modern* berbasis sumber daya terbarukan.

Tabel 3. Penerapan Molecular Docking pada Biomaterial Laut Berbasis Komputasi

No	Biomaterial Laut	Target Protein Biologis	Pendekatan Komputasi	Hasil Utama	Referensi
1	<i>Phlorotannins</i>	18 protein virulensi <i>P. aeruginosa</i>	<i>Molecular Docking</i> , MD, ADMET	2-phloroeckol dan phlorofucofuroeckol memiliki binding affinity tinggi dan stabilitas kompleks baik	[10]
2	<i>Marine collagen</i>	Reseptor NMDA	<i>Molecular Docking</i>	Memiliki interaksi baik dengan nilai $\Delta G -5.25$ kcal/mol	[12]
3	<i>Marine bioactive peptides</i>	Protein biologis wound healing	<i>Molecular Docking</i>	Menunjukkan aktivitas antioksidan dan regeneratif tinggi	[1]
4	<i>Marine natural products</i>	Protein–ligan biologis	CADD dan <i>Molecular Docking</i>	Mempercepat identifikasi kandidat biomaterial dan prediksi bioaktivitas	[19]

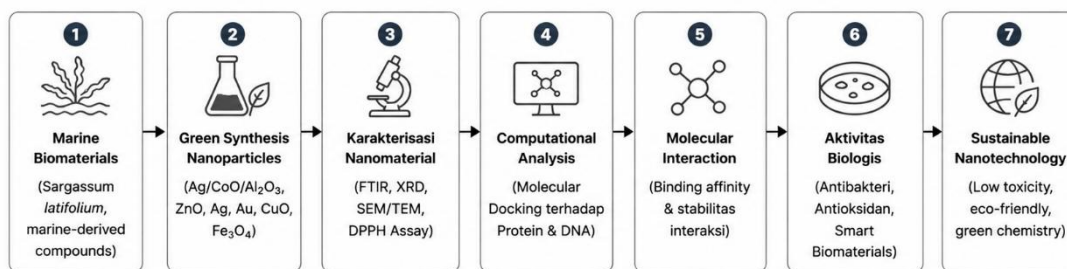
Tabel 3 mendeskripsikan mengenai molecular docking yang menjadi pendekatan komputasi paling dominan dalam pengembangan marine biomaterials modern karena mampu memprediksi *binding affinity*, stabilitas interaksi biomaterial dengan protein target, serta hubungan struktur–bioaktivitas biomaterial laut secara lebih efisien. *Molecular docking* terhadap 18 protein virulensi menggunakan 15 senyawa *phlorotannin* dari alga coklat menghasilkan senyawa 2-phloroeckol dan phlorofucofuroeckol dengan afinitas tinggi dan stabilitas kompleks yang baik terhadap protein target [10]. Selain itu, kolagen *echinoderm* memiliki interaksi baik terhadap reseptor NMDA dengan nilai $\Delta G -5.25$ kcal/mol, sedangkan *marine bioactive peptides* dari *Crassostrea gigas* menunjukkan aktivitas antioksidan dan *wound healing* tinggi melalui *molecular docking* terhadap protein biologis target [11, 12]. Hasil penelitian juga menunjukkan bahwa *molecular docking* mampu mempercepat identifikasi kandidat biomaterial potensial sebelum validasi eksperimental dilakukan karena pendekatan komputasi dapat digunakan untuk memprediksi bioaktivitas dan interaksi protein–ligan secara lebih cepat dan spesifik [19]. Dengan demikian, *molecular docking* menjadi fondasi penting dalam pengembangan *sustainable marine biomaterials* berbasis *computational chemistry* dan *molecular interaction analysis*.

Tabel 4. Penerapan *Molecular Dynamics Simulation* dan *Computational Modeling* pada *Marine Biomaterials*

No	Pendekatan Komputasi	Objek Biomaterial	Fokus Analisis	Hasil Utama	Referensi
1	<i>Molecular Dynamics Simulation</i> (MD)	<i>Biomaterial berbasis biopolimer</i>	Stabilitas biomaterial dan hydrogen bonding	MD simulation efektif menjelaskan hydrogen bonding dan sifat mekanik biomaterial	[8]
2	MD Simulation (50 ns)	<i>Phlorotannin-protein virulensi bakteri</i>	Stabilitas kompleks biomolekul	Kompleks biomolekul tetap stabil selama simulasi berlangsung	[10]
3	DFT dan FEM	<i>Sustainable biopolymers</i>	Desain biomaterial berkelanjutan	Integrasi DFT, FEM, dan machine learning mendukung desain biomaterial modern	[8]
4	<i>Self-assembly nanostructure modeling</i>	<i>Cellulose nanocrystal (CNC)</i>	Perubahan struktur nanoscale	Penambahan >30 wt% TBA mengubah packing CNC menjadi isotropic network	[20]
5	<i>Computational modeling</i>	<i>Marine biomaterials nanoscale</i>	Hubungan struktur-fungsi biomaterial	Digunakan untuk menjelaskan perilaku biomaterial pada tingkat atomistik dan nanoscale	[8], [20]

Selanjutnya, Tabel 4 menjelaskan bahwa *Molecular Dynamics Simulation* (MD simulation) menjadi pendekatan komputasi penting dalam pengembangan *sustainable marine biomaterials* karena mampu mengevaluasi stabilitas kompleks biomaterial-protein serta sifat mekanik biomaterial pada tingkat atomistik dan *nanoscale*. MD simulation digunakan untuk menjelaskan *hydrogen bonding*, interaksi intermolekuler, stabilitas biomaterial, serta perilaku struktur biomaterial berbasis biopolimer yang mendukung desain biomaterial berkelanjutan dengan stabilitas dan performa mekanik yang lebih baik [8]. Selain itu, integrasi *density functional theory* (DFT), *finite element modeling* (FEM), dan *machine learning* mulai digunakan untuk mendukung desain *sustainable biomaterials modern* karena mampu menjelaskan hubungan struktur-fungsi biomaterial secara lebih komprehensif dan efisien. Penelitian *Molecular Dynamics Simulation* selama 50 ns berhasil mengevaluasi stabilitas kompleks *phlorotannin* terhadap protein virulensi bakteri dan menunjukkan bahwa kompleks biomolekul tetap stabil selama simulasi berlangsung [10]. Stabilitas kompleks tersebut menunjukkan bahwa biomaterial laut berbasis *phlorotannin* memiliki potensi sebagai *sustainable antimicrobial biomaterials* karena mampu mempertahankan interaksi molekuler secara stabil terhadap target biologis tanpa memerlukan senyawa sintesis yang berpotensi toksik. Selain itu, penambahan >30 wt% TBA mengubah *Packing Cellulose Nanocrystal* (CNC) menjadi *isotropic network* yang memengaruhi perilaku biomaterial pada tingkat *nanoscale*, terutama dalam meningkatkan distribusi pori, *surface area*, dan kestabilan struktur biomaterial [20]. Perubahan struktur tersebut penting dalam pengembangan *hydrogel*, *scaffold*, dan biomaterial regeneratif karena mampu meningkatkan kekuatan mekanik, kemampuan absorpsi, serta efisiensi interaksi biomaterial terhadap lingkungan biologis. Secara umum, hasil sintesis menunjukkan bahwa *computational modeling* tidak hanya digunakan untuk memahami *molecular interaction biomaterial*, tetapi juga berperan penting dalam optimasi desain *sustainable biomaterials* berbasis biopolimer laut yang lebih stabil, *biodegradable*, dan ramah lingkungan untuk berbagai aplikasi biomaterial modern.

3.3. Pengembangan Green Nanomaterials dan Sustainable Nanotechnology



Gambar 1. Skema alur penelitian dari *marine biomaterials* hingga *sustainable nanotechnology*

Gambar 1 menjelaskan perkembangan *green nanotechnology* berbasis biomaterial laut menunjukkan integrasi antara *marine-derived biomaterials*, karakterisasi nanomaterial, dan pendekatan komputasi untuk menghasilkan *sustainable nanomaterials* berbasis *green chemistry*. Biomaterial laut seperti *Sargassum latifolium* digunakan sebagai sumber biosintesis nanopartikel dan *nanohybrid* berbasis Ag/CoO/Al₂O₃, ZnO, Ag, Au, CuO, dan Fe₃O₄ karena memiliki bioaktivitas tinggi serta mendukung sintesis ramah lingkungan [9]. Proses pengembangan nanomaterial dilakukan melalui karakterisasi FTIR, XRD, SEM/TEM, dan DPPH assay untuk mengevaluasi struktur, morfologi, stabilitas, dan aktivitas antioksidan nanopartikel pada tingkat *nanoscale*. Selain itu, pendekatan *computational analysis* melalui *molecular docking* digunakan untuk memprediksi *binding affinity* dan stabilitas interaksi nanopartikel terhadap protein bakteri maupun DNA sehingga mampu menjelaskan hubungan *molecular interaction* dan aktivitas biologis nanomaterial secara lebih spesifik [21]. Hasil penelitian menunjukkan bahwa *nanohybrid* Ag/CoO/Al₂O₃ memiliki aktivitas antibakteri dan antioksidan tinggi serta menunjukkan *docking* kuat terhadap protein target bakteri [9]. Penelitian lain juga menunjukkan bahwa nanopartikel hasil *green synthesis* memiliki toksisitas lebih rendah, lebih *biodegradable*, dan lebih *eco-friendly* dibandingkan nanopartikel sintesis konvensional sehingga mendukung pengembangan *sustainable nanotechnology* berbasis *marine biomaterials* [21]. Dengan demikian, integrasi biomaterial laut, nanoteknologi hijau, dan *computational chemistry* menjadi pendekatan penting dalam pengembangan *smart biomaterials modern* berbasis sumber daya laut terbarukan.

3.4. Keterbatasan Penelitian Terdahulu

Berdasarkan Tabel 5, penelitian *computational marine biomaterials* masih menghadapi berbagai keterbatasan pada validasi biologis, kompleksitas struktur biomaterial laut, standardisasi ekstraksi, serta *scalability* produksi biomaterial berkelanjutan. Sebagian besar penelitian masih didominasi pendekatan *molecular docking* sederhana dan belum banyak mengintegrasikan *molecular dynamics simulation*, *ADMET prediction*, *machine learning*, maupun *multiscale computational modeling* secara komprehensif [5, 15]. Selain itu, hubungan struktur-fungsi biomaterial laut pada tingkat *nanoscale* masih belum sepenuhnya dipahami sehingga

pengembangan *marine nanobiomaterials* dan *smart biomaterials* masih menjadi tantangan utama [5]. Hasil sintesis juga menunjukkan bahwa integrasi *AI-based biomaterials design*, *sustainable nanotechnology*, dan *green biomaterials engineering* menjadi arah *future research* yang potensial dalam mendukung pengembangan *computational marine biomaterials* berbasis *sustainability* dan sumber daya laut terbarukan [14, 19]

Tabel 5. *Research Gap*, Keterbatasan, Tantangan, dan Arah *Future Research* pada *Computational Marine Biomaterials*

No	Aspek	Temuan/Kondisi Saat Ini	Keterbatasan dan Tantangan	Future Research	Referensi
1	Validasi biologis	Penelitian <i>molecular docking</i> dan simulasi banyak dilakukan secara <i>in silico</i>	Belum banyak <i>validasi in vitro</i> dan <i>in vivo</i>	Integrasi studi komputasi dengan validasi biologis eksperimental	[3], [10]
2	<i>Molecular interaction analysis</i>	<i>Molecular docking</i> dominan digunakan pada <i>marine biomaterials</i>	Masih terbatas pada <i>docking</i> sederhana	Integrasi MD <i>simulation</i> , ADMET, dan <i>multiscale simulation</i>	[10]
3	Struktur biomaterial laut	<i>Marine polysaccharides</i> memiliki struktur kompleks dan heterogen	<i>Computational modeling</i> lebih sulit dibanding <i>small molecules</i>	Pengembangan <i>AI-driven biomaterial modeling</i>	[8]
4	Struktur–fungsi nanoscale	Hubungan struktur–fungsi biomaterial <i>nanoscale</i> belum dipahami sepenuhnya	Stabilitas dan perilaku <i>nanoscale</i> masih kompleks	Pengembangan <i>nanoscale computational biomaterials</i>	[4]
5	Standardisasi biomaterial	Belum ada standardisasi ekstraksi biomaterial laut	Variasi bahan baku dan <i>sustainability sourcing</i>	Standardisasi metode ekstraksi biomaterial <i>marine-derived</i>	[2]
6	Produksi biomaterial	<i>Marine biomaterials</i> potensial untuk aplikasi terapi dan biomaterial modern	<i>Scalability</i> produksi dan regulasi industri masih terbatas	<i>Industrial-scale sustainable biomaterials production</i>	[1]
7	<i>Marine nanobiomaterials</i>	<i>Green synthesized nanoparticles</i> menunjukkan bioaktivitas tinggi	<i>Bioavailability</i> dan stabilitas material masih menjadi kendala	<i>Smart nanobiomaterials dan biosensor systems</i>	[5], [9]
8	<i>Computational biomaterials</i>	<i>Computational chemistry</i> mulai terintegrasi dengan biomaterial laut	Penggunaan <i>machine learning</i> masih sangat terbatas	<i>AI-based biomaterials design dan predictive biomaterials systems</i>	[8], [19]
9	<i>Sustainable biomaterials engineering</i>	<i>Marine biomaterials</i> mendukung <i>green chemistry</i> dan <i>circular bioeconomy</i>	Translasi klinis dan regulasi biomaterial masih rendah	<i>Green biomaterials engineering</i> berbasis <i>sustainability</i>	[2], [21]
10	<i>Interdisciplinary integration</i>	Penelitian mulai mengintegrasikan <i>chemistry</i> , <i>nanotechnology</i> , dan <i>biotechnology</i>	Integrasi multidisiplin masih belum komprehensif	<i>Computational marine biomaterials sebagai frontier research</i>	[19], [21]

4. Kesimpulan

Penelitian ini menunjukkan bahwa biomaterial laut memiliki potensi besar sebagai *sustainable biomaterials* melalui integrasi *computational chemistry*, *molecular interaction analysis*, dan *green material engineering*. Pendekatan seperti *molecular docking* dan *molecular dynamics simulation* mampu mendukung analisis struktur–bioaktivitas biomaterial secara lebih efisien serta mempercepat pengembangan *hydrogel*, *scaffold*, *nanocarrier*, dan *smart biomaterials* berbasis sumber daya laut. Penelitian ini juga memperlihatkan bahwa *computational marine biomaterials* berpotensi menjadi *frontier research* berbasis *sustainability*. Penelitian selanjutnya perlu mengintegrasikan *AI-*

based biomaterials design, multiscale simulation, serta validasi *in vitro* dan *in vivo* untuk meningkatkan translasi dan aplikasi biomaterial laut modern.

Kontribusi Penulis

A.N. Dienna: berkontribusi dalam konseptualisasi penelitian, penyusunan metode systematic review, pencarian dan seleksi literatur, analisis data, serta penyusunan draf awal naskah. **A.A Ananda:** berkontribusi dalam analisis dan interpretasi literatur, penyusunan pembahasan, serta revisi substansi naskah. **R.M. Larasati:** berperan dalam supervisi penelitian, penelaahan kritis terhadap isi naskah, penyuntingan akhir, dan validasi hasil kajian. Seluruh penulis telah membaca, menyetujui versi akhir naskah, dan bertanggung jawab atas isi artikel.

Konflik Kepentingan

Penulis menyatakan bahwa tidak terdapat konflik kepentingan, baik yang bersifat finansial, profesional, maupun hubungan pribadi, yang dapat memengaruhi proses penyusunan, analisis, interpretasi, maupun pelaporan hasil literature review dalam manuskrip ini. Seluruh penulis telah menyusun artikel secara independen berdasarkan kajian ilmiah terhadap literatur yang relevan.

Ucapan Terimakasih

Penulis mengucapkan terima kasih kepada seluruh tim penelitian atas dukungan, kolaborasi, dan kontribusi selama penyusunan penelitian *literatur review* ini.

Daftar Pustaka

- [1] M. Chilwant, V. Paganini, M. Di Gangi, S. G. Brignone, P. Chetoni, S. Burgalassi, D. Monti, and S. Tampucci, "From Sea to Therapy: Marine Biomaterials for Drug Delivery and Wound Healing," *Pharmaceuticals*, vol. 18, no. 8, Art. no. 1093, Aug. 2025, doi: 10.3390/ph18081093.
- [2] H. Chellapandian, S. Jeyachandran, K. Park, and I. S. Kwak, "Marine-Derived Functional Biomaterials: Advancements in Biomedicine and Drug Delivery Applications," *Critical Reviews in Therapeutic Drug Carrier Systems*, Jun. 2025, doi: 10.1177/1934578X241302009.
- [3] S. Mohan, P. Karunanithi, M. R. Murali, K. A. Ayob, J. Megala, K. Genasan, T. Kamarul, and H. R. B. Raghavendran, "Potential use of 3D CORAGRAF-loaded PDGF-BB in PLGA microsphere seeded mesenchymal stromal cells in enhancing the repair of calvaria critical-size bone defect in rat model," *Marine Drugs*, vol. 20, no. 9, Art. no. 561, Sep. 2022, doi: 10.3390/md20090561.
- [4] M. A. Ward and T. K. Georgiou, "Thermoresponsive polymers for biomedical applications," *Polymers*, vol. 3, no. 3, pp. 1215–1242, Aug. 2011, doi: 10.3390/polym3031215.
- [5] A. Karthikeyan, A. Javaid, N. Tabassum, T.-H. Kim, Y.-M. Kim, W.-K. Jung, and F. Khan, "Marine-derived phlorotannins: Sustainable inhibitors of multiple virulence factors in *Pseudomonas aeruginosa*," *AMB Express*, vol. 15, Art. no. 162, Oct. 2025, doi: 10.1186/s13568-025-01963-w.

- [6] D. Yu, S. Cui, L. Chen, S. Zheng, D. Zhao, X. Yin, F. Yang, and J. Chen, "Marine-derived bioactive peptides self-assembled multifunctional materials: Antioxidant and wound healing," *Antioxidants*, vol. 12, no. 6, Art. no. 1190, Jun. 2023, doi: 10.3390/antiox12061190.
- [7] X.-Y. Cao, C.-M. Pang, Y. Xiao, W.-Q. Xiao, S.-H. Luo, J.-P. He, and Z.-Y. Wang, "Preparation of large conjugated polybenzimidazole fluorescent materials and their application in metal ion detection," *Polymers*, vol. 13, no. 18, Art. no. 3091, Sep. 2021, doi: 10.3390/polym13183091.
- [8] R. Rozirwan, Y. Winarta, I. Isnaini, R. Aryawati, N. N. Khotimah, and R. Y. Nugroho, "Echinoderm collagen as a neuromodulatory antioxidant: Biochemical characterization and molecular interaction with NMDA receptor," *Arch. Biochem. Biophys.*, vol. 779, May 2026, doi: 10.1016/j.abb.2026.110758.
- [9] H. L. Sullivan, Y. Liang, K. Worthington, C. Luo, N. C. Gianneschi, and K. L. Christman, "Enzyme-Responsive Nanoparticles for the Targeted Delivery of an MMP Inhibitor to Acute Myocardial Infarction," *Biomacromolecules*, vol. 24, no. 11, pp. 4695–4704, Nov. 2023, doi: 10.1021/acs.biomac.3c00421
- [10] M. Saeed, S. Anjum, and Y. Zhang, "Harnessing marine-derived materials for therapeutics innovations: Advances in biomaterials from the ocean," Dec. 01, 2025, *Elsevier B.V.* doi: 10.1016/j.mtbio.2025.102375.
- [11] D. N. Carvalho, C. Gonçalves, R. O. Sousa, R. L. Reis, J. M. Oliveira, and T. H. Silva, "Extraction and Purification of Biopolymers from Marine Origin Sources Envisaging Their Use for Biotechnological Applications," Dec. 01, 2024, *Springer*. doi: 10.1007/s10126-024-10361-5.
- [12] P. Ghalsasi, G. Chithiravelu, and B. Joddar, "Seaweed Derived Polysaccharides as Sustainable Biomaterials for Tissue Engineering Applications," Nov. 10, 2025, *American Chemical Society*. doi: 10.1021/acsbiomaterials.5c01301.
- [13] W. Zhang, X. Jiang, M. Wang, Z. Zhang, and N. Wang, "Origin of the 6/5/6/5 Tetracyclic Cyclopiazonic Acids," *Mar. Drugs*, vol. 22, no. 2, Feb. 2024, doi: 10.3390/md22020074.
- [14] X. Li, X. Chen, Y. Xu, J. Wei, L. Zhou, X. Li, Q. Chen, D. Li, and Q. Chen, "Marine bioactive materials: From design strategies to biological properties and multidisciplinary applications," *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, vol. 74, no. 13, Mar. 2026, doi: 10.1021/acs.jafc.5c13494.
- [15] S. Mazumder, M. H. Golbabaei, and N. Zhang, "Advances in Computational Modeling and Machine Learning of Cellulosic Biopolymers: A Comprehensive Review," Dec. 01, 2025, *Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI)*. doi: 10.3390/biomimetics10120802.
- [16] W. Zhang, X. Jiang, M. Wang, Z. Zhang, and N. Wang, "Origin of the 6/5/6/5 Tetracyclic Cyclopiazonic Acids," *Mar. Drugs*, vol. 22, no. 2, Feb. 2024, doi: 10.3390/md22020074.
- [17] K. Bakhodir Abdullajonovich, M. Muhsin Hassan, P. Mahadevan, and D. Chetan Kumar, "Marine-Inspired Drug Design: A New Approach to Pharmaceutical Development Feruza Azizova Tashkent Medical Academy," vol. 32, no. S6, p. 2025.
- [18] S. Llácer Navarro, E. Orzan, R. Janewithayapun, P. Penttilä, J. Andersson, A. Ström, R. Kádár, and T. Nypelö, "Tert-butanol as a structuring agent for cellulose nanocrystal fluids and foams," *Biomacromolecules*, vol. 26, no. 9, pp. 5591–5600, Sep. 2025, doi: 10.1021/acs.biomac.5c00184.
- [19] M. S. Alshammari, B. Alamer, M. M. Alharbi, O. Alaysuy, M. M. Alnoman, A. F. Alrefaei, A. Sayqal, and N. M. El-Metwaly, "Marine algae-derived Ag/Al₂O₃ and Ag/CoO/Al₂O₃ nanohybrids: A green approach to phytochemical profiling, molecular docking, and bioactivity assessment," *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, vol. 37, Art. no. 52, Mar. 2026, doi: 10.1007/s10856-025-06987-z.
- [20] P. Kar, A. O. Oriola, and A. O. Oyedeji, "Molecular Docking Approach for Biological Interaction of Green Synthesized Nanoparticles," Jun. 01, 2024, *Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI)*. doi: 10.3390/molecules29112428.

- [21] C. Lauritano, E. Montuori, G. De Falco, and S. Carrella, “In Silico Methodologies to Improve Antioxidants’ Characterization from Marine Organisms,” Mar. 01, 2023, *MDPI*. doi: 10.3390/antiox12030710.