



Nexus: Jurnal Sains dan Teknologi

Homepage jurnal: https://ojs.polmed.ac.id/index.php/nexus_sains_dan_teknologi



Biomaterial Laut Berbasis Kimia Komputasi untuk Nanoteknologi Hijau: Literature Review

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

^{a,b}Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung, Jl. Prof. Dr. Sumantri Brojonegoro No. 1, Gedong Meneng, Kec. Rajabasa, Kota Bandar Lampung, Lampung, 35145, Indonesia

^cFakultas Kedokteran, Universitas Lampung, Jl. Prof. Dr. Sumantri Brojonegoro No. 1, Gedong Meneng, Kec. Rajabasa, 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 April 2026

Direvisi pada April 2026

Disetujui pada Mei 2026

Tersedia daring pada Mei 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 22 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.

ABSTRACT

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 22 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

Pada 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], [2], [19], [20] Selain itu, integrasi biomaterial laut dengan green technology dan circular bioeconomy semakin memperkuat pengembangan sustainable functional materials berbasis sumber daya laut terbarukan [5], [6], [21]. 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 [7], [22]

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 [8], [9], [10]. 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 [7].

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 22 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

Tabel 1.1. 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], [9]
3	Chitosan	Low toxicity, biodegradable, antibakteri	Wound healing, scaffold, hydrogel, nanocarrier	Chitosan memiliki biokompatibilitas tinggi dan efektif untuk biomaterial regeneratif	[1], [11]
4	Marine Collagen	Regeneratif, low immunogenicity	Tissue engineering, regenerative therapy	Marine collagen efektif mendukung regenerasi jaringan dan implant biomaterial	[6], [11]
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	[9]
8	Phlorotannins	Multi-target bioactivity dan ramah lingkungan	Antimicrobial biomaterials	Phlorotannins memiliki binding affinity tinggi terhadap protein target bakteri	(Karthikeyan et al., 2025)
9	Marine Polysaccharides	Mudah membentuk scaffold dan hydrogel	Smart biomaterials dan nanomaterials	Polisakarida laut mendominasi biomaterial modern karena stabilitas dan bioaktivitasnya	(Chen et al., 2024); (Xin Li et al., 2026)
10	Marine Nanobiomaterials	Targeted delivery dan stabilitas tinggi	Green nanomaterials dan biosensor	Integrasi nanoteknologi meningkatkan bioavailability dan targeted delivery biomaterial laut	(Xin Li et al., 2026)

Tabel 1.1, 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], [3], [4]. 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* [8], [9]. Integrasi nanoteknologi mampu meningkatkan bioavailability, stability, dan targeted delivery marine biomaterials sehingga memperluas pengembangan smart biomaterials berbasis sumber daya laut [9]. Sementara itu, marine collagen dan marine peptides diketahui memiliki kemampuan regeneratif tinggi yang mendukung regenerative medicine dan biomaterial fungsional berbasis marine resources [11]. Hasil analisis dari literatur review juga menunjukkan bahwa biomaterial laut mulai dikembangkan sebagai alternatif biomaterial sintetis karena lebih mendukung konsep circular economy, green chemistry, dan sustainable material engineering berbasis sumber daya terbarukan.

Berdasarkan Tabel 1.2, 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 [12]. 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 [13]. 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 [12]. 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 1.2. Karakteristik Struktur dan Performa Polisakarida Laut pada Biomaterial Modern

No	Jenis Polisakarida Laut	Gugus/Fitur Struktur Dominan	Performa Biomaterial	Parameter Hasil Penelitian	Referensi
1	Fucoidan	Gugus sulfat dan hidroksil	Aktivitas bioaktif dan stabilitas scaffold	Menunjukkan bioaktivitas tinggi dan kemampuan scaffold yang baik	[12]
2	Alginate	Gugus karboksilat dan hidroksil	Pembentukan hydrogel stabil	Efektif membentuk jaringan hydrogel dan controlled release system	[2]
3	Chitosan	Gugus amino dan hidroksil	Biokompatibilitas dan toksisitas rendah	Efektif untuk wound dressing dan drug carrier	[13]
4	Carrageenan	Gugus sulfat polisakarida	Stabilitas jaringan biomaterial	Memiliki scaffold properties yang baik	[12]
5	Agarose	Struktur gel polisakarida	Kemampuan gel-forming tinggi	Digunakan sebagai hydrogel dan tissue scaffold	[12]
6	Polisakarida Laminaria japonica	Gugus hidroksil dan asam uronat	Swelling dan hemostatic properties	Swelling ratio mencapai ± 14 kali berat awal	[5]

Tabel 1.3. Penerapan Molecular Docking pada Biomaterial Laut Berbasis Komputasi

No	Biomaterial Laut	Target Protein Biologis	Pendekatan Komputasi	Hasil Utama	Referensi
1	Phlorotannins	18 protein virulensi <i>P. aeruginosa</i>	Molecular Docking, MD, ADMET	2-phloroeckol dan phlorofucofuroeckol memiliki binding affinity tinggi dan stabilitas kompleks baik	[8]
2	Marine collagen	Reseptor NMDA	Molecular Docking	Memiliki interaksi baik dengan nilai ΔG -5.25 kcal/mol	[10]
3	Marine bioactive peptides	Protein biologis wound healing	Molecular Docking	Menunjukkan aktivitas antioksidan dan regeneratif tinggi	[9]
4	Marine natural products	Protein–ligan biologis	CADD dan Molecular Docking	Mempercepat identifikasi kandidat biomaterial dan prediksi bioaktivitas	[14]

Tabel 1.3 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 [8]. Selain itu, kolagen echinoderm memiliki interaksi baik terhadap reseptor NMDA dengan nilai ΔG -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 [9], [10]. 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 [14] Dengan demikian, molecular docking menjadi fondasi penting dalam pengembangan sustainable marine biomaterials berbasis computational chemistry dan molecular interaction analysis.

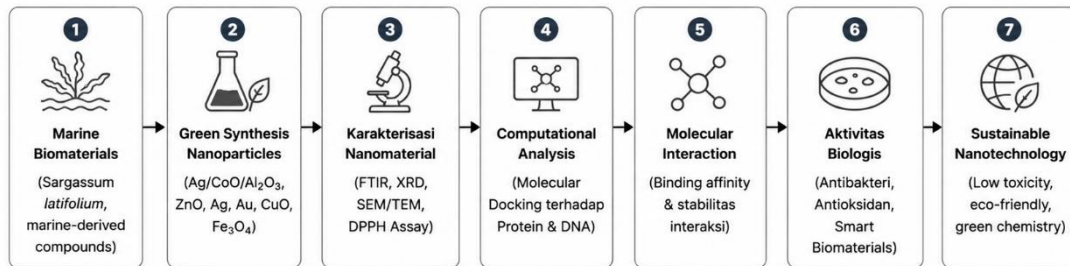
Tabel 1.4. Penerapan Molecular Dynamics Simulation dan Computational Modeling pada Marine Biomaterials

No	Pendekatan Komputasi	Objek Biomaterial	Fokus Analisis	Hasil Utama	Referensi
1	Molecular Dynamics Simulation (MD)	Biomaterial berbasis biopolimer	Stabilitas biomaterial dan hydrogen bonding	MD simulation efektif menjelaskan hydrogen bonding dan sifat mekanik biomaterial	[7]
2	MD Simulation (50 ns)	Phlorotannin–protein virulensi bakteri	Stabilitas kompleks biomolekul	Kompleks biomolekul tetap stabil selama simulasi berlangsung	[8]
3	DFT dan FEM	Sustainable biopolymers	Desain biomaterial berkelanjutan	Integrasi DFT, FEM, dan machine learning mendukung desain biomaterial modern	[7]
4	Self-assembly nanostructure modeling	Cellulose nanocrystal (CNC)	Perubahan struktur nanoscale	Penambahan >30 wt% TBA mengubah packing CNC menjadi isotropic network	[15]
5	Computational modeling	Marine biomaterials nanoscale	Hubungan struktur–fungsi biomaterial	Digunakan untuk menjelaskan perilaku biomaterial pada tingkat atomistik dan nanoscale	[7], [15]

Selanjutnya, Tabel 1.4 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 [7]. 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 [8]. 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 [15]. 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 2. Skema alur penelitian dari marine biomaterials hingga susitanable nanotechnology

Gambar 2 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 [16]. 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 [17]. Hasil penelitian menunjukkan bahwa nanohybrid Ag/CoO/Al₂O₃ memiliki aktivitas antibakteri dan antioksidan tinggi serta menunjukkan docking kuat terhadap protein target bakteri [16]. 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 [17]. 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 1.5, 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 (Karthikeyan et al., 2025; Mazumder et al., 2025). 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], [18]

Tabel 1.5. 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 molecular docking dan simulasi banyak dilakukan secara in silico	Belum banyak validasi in vitro dan in vivo	Integrasi studi komputasi dengan validasi biologis eksperimental	[8], [19]
2	Molecular interaction analysis	Molecular docking dominan digunakan pada marine biomaterials	Masih terbatas pada docking sederhana	Integrasi MD simulation, ADMET, dan multiscale simulation	[8]
3	Struktur biomaterial laut	Marine polysaccharides memiliki struktur kompleks dan heterogen	Computational modeling lebih sulit dibanding small molecules	Pengembangan AI-driven biomaterial modeling	[7]
4	Struktur-fungsi nanoscale	Hubungan struktur–fungsi biomaterial nanoscale belum dipahami sepenuhnya	Stabilitas dan perilaku nanoscale masih kompleks	Pengembangan nanoscale computational biomaterials	[20]
5	Standardisasi biomaterial	Belum ada standardisasi ekstraksi biomaterial laut	Variasi bahan baku dan sustainability sourcing	Standardisasi metode ekstraksi biomaterial marine-derived	[2]
6	Produksi biomaterial	Marine biomaterials potensial untuk aplikasi terapi dan biomaterial modern	Scalability produksi dan regulasi industri masih terbatas	Industrial-scale sustainable biomaterials production	[1]
7	Marine nanobiomaterials	Green synthesized nanoparticles menunjukkan bioaktivitas tinggi	Bioavailability dan stabilitas material masih menjadi kendala	Smart nanobiomaterials dan biosensor systems	[5], [16]
8	Computational biomaterials	Computational chemistry mulai terintegrasi dengan biomaterial laut	Penggunaan machine learning masih sangat terbatas	AI-based biomaterials design dan predictive biomaterials systems	[7], [14]
9	Sustainable biomaterials engineering	Marine biomaterials mendukung green chemistry dan circular bioeconomy	Translasi klinis dan regulasi biomaterial masih rendah	Green biomaterials engineering berbasis sustainability	[2], [17]
10	Interdisciplinary integration	Penelitian mulai mengintegrasikan chemistry, nanotechnology, dan biotechnology	Integrasi multidisiplin masih belum komprehensif	Computational marine biomaterials sebagai frontier research	[14], [17]

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

Penulis berkontribusi dalam konsep literatur review, pengumpulan dan analisis literatur, serta penyusunan naskah. Seluruh penulis menyetujui versi akhir artikel untuk dipublikasikan.

Konflik Kepentingan

Penulis menyatakan tidak memiliki konflik kepentingan finansial maupun hubungan pribadi yang memengaruhi penelitian literatur review dalam manuskrip ini.

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 *et al.*, “From Sea to Therapy: Marine Biomaterials for Drug Delivery and Wound Healing,” Aug. 01, 2025, *Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI)*. 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,” Jun. 01, 2025, *SAGE Publications Inc.* doi: 10.1177/1934578X241302009.
- [3] X. Li *et al.*, “Marine Bioactive Materials: From Design Strategies to Biological Properties and Multidisciplinary Applications,” Apr. 08, 2026, *American Chemical Society*. doi: 10.1021/acs.jafc.5c13494.
- [4] S. Mazumder, M. H. Golbabaie, 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.
- [5] A. Karthikeyan *et al.*, “Marine-derived phlorotannins: sustainable inhibitors of multiple virulence factors in *Pseudomonas aeruginosa*,” *AMB Express*, vol. 15, no. 1, Dec. 2025, doi: 10.1186/s13568-025-01963-w.

- [6] D. Yu *et al.*, “Marine-Derived Bioactive Peptides Self-Assembled Multifunctional Materials: Antioxidant and Wound Healing,” *Antioxidants*, vol. 12, no. 6, Jun. 2023, doi: 10.3390/antiox12061190.
- [7] Rozirwan *et al.*, “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.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] S. Llácer Navarro *et al.*, “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.
- [14] M. S. Alshammari *et al.*, “Marine algae-derived Ag/Al₂O₃ and Ag/CoO/Al₂O₃ nanohybrids: A green approach to phytochemical profiling, molecular docking, and bioactivity assessment,” *J. Mater. Sci. Mater. Med.*, vol. 37, no. 1, Dec. 2026, doi: 10.1007/s10856-025-06987-z.
- [15] P. Kar, A. O. Oriola, and A. O. Oyediji, “Molecular Docking Approach for Biological Interaction of Green Synthesized Nanoparticles,” Jun. 01, 2024, *Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI)*. doi: 10.3390/molecules29112428.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] X. Li *et al.*, “Marine Bioactive Materials: From Design Strategies to Biological Properties and Multidisciplinary Applications,” Apr. 08, 2026, *American Chemical Society*. doi: 10.1021/acs.jafc.5c13494.
- [19] M. Mohan *et al.*, “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,” 2022.
- [20] S. Vinchurkar *et al.*, “Thermo-responsive marine biomaterials for sustainable biomedical applications,” 2025.

- [21] 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," 2021.
- [22] 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.