

BAB II

KAJIAN PUSTAKA

A. Kajian Teori

1. E-Monograf Berbasis Riset

E-Monograf riset adalah karya ilmiah yang berfokus secara mendalam pada suatu topik penelitian tertentu. Biasanya, monograf riset mencakup pengumpulan data, analisis, interpretasi, dan penyajian temuan secara rinci dan terperinci. Tujuannya adalah untuk menyampaikan pengetahuan baru atau pemahaman yang lebih dalam tentang topik tersebut kepada pembaca. E-monograf berbasis riset adalah suatu bentuk publikasi ilmiah yang berisi hasil-hasil penelitian yang telah dilakukan oleh dosen dan mahasiswa dalam berbagai bidang ilmu. E-monograf ini memiliki tujuan untuk mempublikasikan hasil-hasil penelitian yang telah dilakukan dalam bentuk digital, sehingga dapat diakses oleh lebih banyak orang dan meningkatkan kualitas penelitian di Indonesia.

Dalam konteks jurnal ilmiah, e-monograf riset sering kali diwakili oleh artikel penelitian yang panjang dan mendalam. Artikel tersebut mencakup semua aspek dari penelitian, mulai dari latar belakang dan tujuan penelitian, metodologi yang digunakan, analisis data, hingga kesimpulan dan implikasi temuan. Monograf riset dapat membahas hasil penelitian yang original, ulasan terperinci tentang topik tertentu, atau pemikiran teoritis yang mendalam. E-monograf berbasis

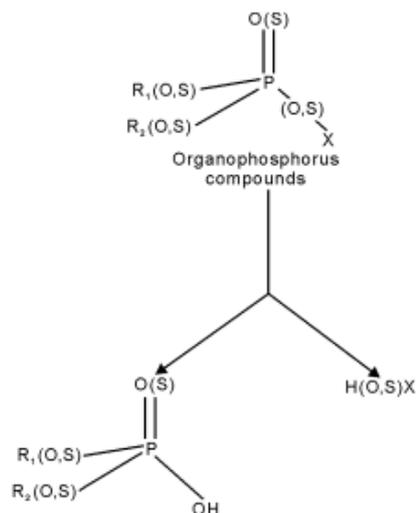
riset adalah bahwa penelitian telah menjadi bagian penting dalam meningkatkan kualitas pendidikan dan meningkatkan kemampuan mahasiswa dalam berbagi hasil-hasil penelitian. Dengan menggunakan teknologi informasi, e-monograf dapat membantu dalam meningkatkan akses ke informasi dan meningkatkan kemampuan peneliti dalam berbagi hasil-hasil penelitian. E-monograf berbasis riset memiliki beberapa manfaat, seperti meningkatkan kualitas penelitian, meningkatkan akses ke informasi, dan meningkatkan kemampuan peneliti dalam berbagi hasil-hasil penelitian. Selain itu, e-monograf juga dapat membantu dalam meningkatkan kualitas pendidikan dan meningkatkan kemampuan mahasiswa dalam berbagi hasil-hasil penelitian.

Dalam beberapa penelitian, e-monograf telah digunakan untuk mempublikasikan hasil-hasil penelitian yang telah dilakukan oleh dosen dan mahasiswa. Misalnya, penelitian yang dilakukan oleh (Rizki Fadhil Pratama, 2017) menggunakan e-monograf untuk mempublikasikan hasil-hasil penelitian tentang biodegradasi pestisida organofosfat dengan menggunakan molekular docking. Hasil penelitian menunjukkan bahwa e-monograf dapat membantu dalam meningkatkan kualitas penelitian dan meningkatkan akses ke informasi. Dengan demikian, e-monograf berbasis riset menjadi sangat penting dalam meningkatkan kualitas penelitian dan meningkatkan akses ke informasi. E-monograf dapat membantu dalam meningkatkan kualitas pendidikan

dan meningkatkan kemampuan mahasiswa dalam berbagi hasil-hasil penelitian.

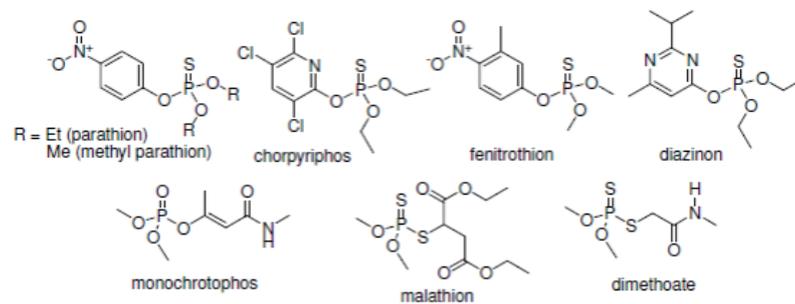
2. Pestisida Organofosfat

Pestisida organofosfat meruakan kelompok pestisida yang paling diminati secara komersial dengan area aplikasi yang luas di seleruh dunia. Antara tahun 2001 dan 2007, 334 juta pon pestisida organofosfat digunakan di Amerika Serikat saja. Obat-obatan yang paling umum digunakan adalah klorpirifos, malathion, asefat, dikrotofos, diazinon, naled, dan fosmet. Pestisida organofosfat (senyawa organofosfat) didefinisikan sebagai senyawa organik yang dapat terurai, biasanya turunan asam fosfat, fosfonat, fosfinat, atau tiofosfat dalam bentuk ester, amida, atau tiol (S. Kumar et al., 2018)



Gambar 2.1 Rumus umum pestisida organofosfat dan fungsinya biotransformasi (S. Kumar et al., 2018)

Organofosfat dapat digolongkan menjadi beberapa golongan antara lain, fosfat, fosforothioat, fosforamidat, fosfonat, dan sebagainya. Contoh dari organofosfat antara lain insektisida (malathion, parathion, diazinon, fenitrothion, dichlorvos, chlorpyrifos, etion), dan anthelmintic (trichlorfon) (Dryulia, 2021) .



Gambar 2.2 Struktur kimia berbagai pestisida kelompok organofosfat (Indriyani, 2021)

Penelitian sebelumnya telah menunjukkan bahwa residu pestisida memiliki dampak negatif jangka panjang terhadap lingkungan. Mengandung zat berbeda untuk meningkatkan efektivitas dan konsistensi komposisi. Ini termasuk surfaktan non-ionik seperti alkilfenol etoksilat (APEO), alcohol etoksilat (AEO), alkilamina etoksilat (ANEEO), organosilicon pilietoksilat dan amina polietotoksilat alifatik, serta pelarut bersama seperti N-metil-2-pirolidon (NMP), yang meningkatkan kelarutan bahan aktif dan memberikan efek perlindungan (Pujiati, 2024).

Bahan kimia aktif dalam pestisida memiliki banyak fungsi berbeda, misalnya: aplikasi, penekanan busa, pewarnaan,

pencegahan penyimpanan dan lain-lain. Fitur-fitur ini mempengaruhi sifat fisik dan kimia produk pestisida. Bahan kimia aktif merupakan bahan penting dalam produk agrokimia yang berfungsi sebagai dispersan, penghilang busa, pewarna, zat anti drift dan memodifikasi sifat fisikokimia tersebut (Pujiati, 2024).

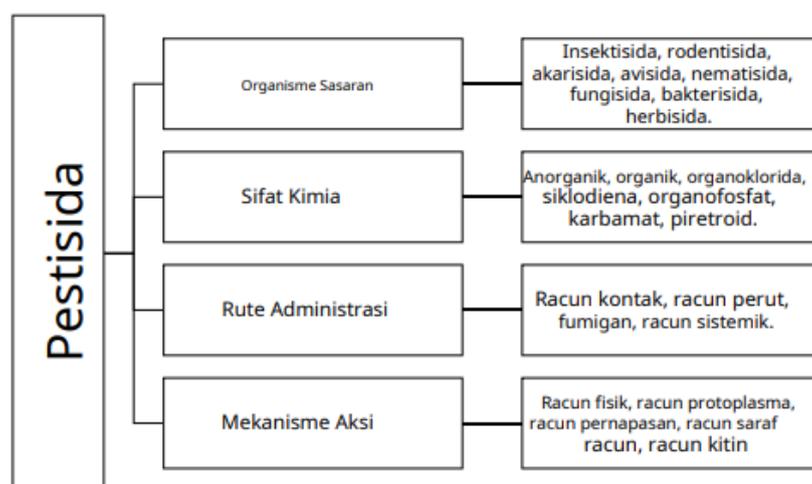
Residu pestisida dapat meningkatkan toksisitas selain bahan aktifnya. POEA, surfaktan yang digunakan dalam herbisida glisofat dapat bersifat racun. Campuran pestisida yang tersedia secara komersial dapat menimbulkan risiko lebih besar diandingkan bahan aktifnya saja. Hal ini telah ditunjukkan oleh penelitian dengan bifenthrin, fipronil, carbaryl, malathion, imidacloprid, azoxystrobin, dan tebuconazole. Herbisida seperti 2,4-D, aminopyralid dan dicamba diketahui dapat membahayakan tanaman dan hewan. Efek-efek ini termasuk sitotoksinitas, genotoksinitas, mutagenisitas dan efek hispatologi (Pujiati, 2024).

Dampak lingkungan dan cakupan kontaminasi pestisida besar dan beragam. Pestisida dirancang untuk mengendalikan hama dan meningkatkan hasil pertanian, tetapi pestisida juga dapat menimbulkan efek samping yang tidak diinginkan. Pestisida dapat memasuki saluran air melalui limpasan dari lahan pertanian, mencemari air dan merusak habitat perairan. Kontaminasi tanah jangka panjang dengan pestisida tertentu dapat membahayakan organisme non-target dan mengganggu ekosistem tanahkontaminasi

yang meluas menyoroti pentingnya Teknik pengelolaan pestisida berkelanjutan dalam mengurangi kerusakan lingkungan (Pathways & Factors, 2023).

Kebertahanan dan bioakumulasi Sebagian besar pestisida menimbulkan masalah kesehatan masyarakat. Hal ini dikarenakan bahan aktif pestisida dapat bersifat racun dan mematikan bagi organisme non-target (Skendži et al., 2021). Toksisitas residu pestisida di berbagai kompartemen lingkungan dibuktikan dengan keracunan pestisida yang menyebabkan sekitar satu juta kematian dan penyakit kronis (Skendži et al., 2021). Karena tanaman dan hasil panen mendapatkan nutrisi yang mereka butuhkan dari tanah, mereka dapat menyerap bahan kimia pestisida berbahaya dari tanah (Pathways & Factors, 2023).

2.1 Jenis-jenis pestisida



Gambar 2.3 Berbagai cara klasifikasi pestisida (Kai et al., 2024)

Pestisida dapat diklasifikasikan menurut organisme target, komposisi kimia, metode pemberian dan mekanisme kerja. Klasifikasi berdasarkan organisme target dan sifat kimia adalah cara yang paling umum untuk mengklasifikasikan pestisida. Metode pertama mengklasifikasikan pestisida ke dalam kategori seperti insektisida, rodentisida, fungisida, dll. Metode kedua mengklasifikasikan menjadi pestisida organik dan anorganik, sedangkan pestisida organik diklasifikasikan menjadi pestisida organoklorin, pestisida organofosfat, pestisida karbamat dan seterusnya (Brief, 2018).

Pestisida dapat diklasifikasikan menurut cara kerjanya yang mencerminkan proses biokimia atau fisiologi spesifik yang ditargetkan pada hama. Neurotoksin seperti organofosfat (malathion) dan piretroid (permetrin) mengganggu sistem saraf hama. Inhibitor mitokondria seperti rotenone menghambat respirasi seluler serangga hama dengan menghalangi rantai transport elektron ke dalam mitokondria. Inhibitor mitokondria seperti rotenon menghambat respirasi seluler serangga hama dengan menghalangi rantai transport elektron dalam mitokondria (Zikankuba et al., 2019)(Brief, 2018)(Zhichkina et al., 2020).

2.2 Nasib lingkungan dari pestisida

Tindakan pestisida dalam tanah dipengaruhi oleh sejumlah mekanisme fisik, kimia, dan biologi yang kompleks dan dinamis. Setelah aplikasi pestisida dilepaskan ke atmosfer kemudian diserap oleh

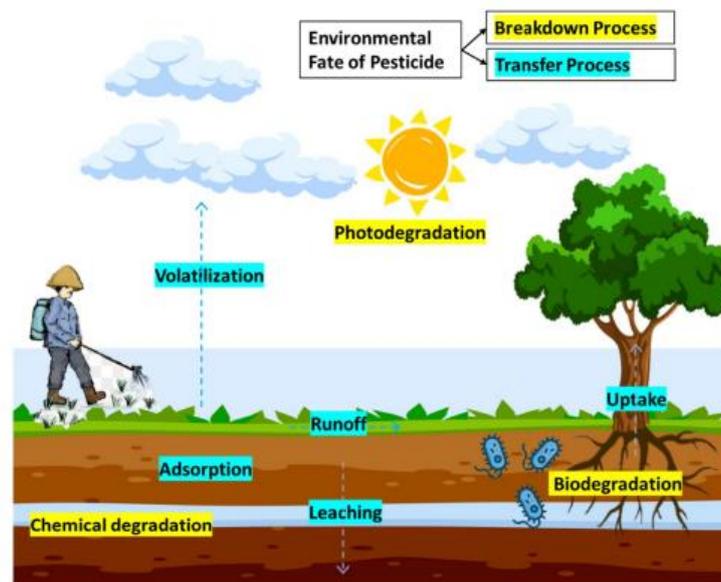
tanah dan terlarut dalam air, kemudian didegradasi secara mikrobiologi melalui fotolisis (Skendži et al., 2021)(Use, 2023)(M. Kumar et al., 2021).

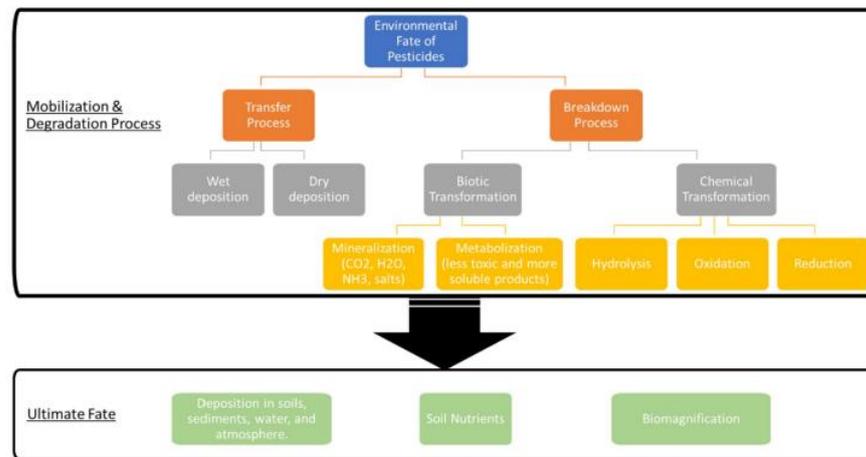
Pestisida menempel pada partikel tanah melalui penyerapan, sedangkan istilah adsorpsi sering digunakan untuk menggambarkan tarikan bahan kimia oleh tanah (M. Kumar et al., 2021). Tanah dengan kandungan lempung dan bahan organik tinggi sangat rentan terhadap penyerapan pestisida karena tanah tersebut aktif secara kimia dan memiliki luas permukaan yang besar. Sehingga memberikan banyak peluang untuk penyerapan senyawa pestisida. Selain itu, pestisida lebih mudah diserap di tanah kering karena tidak ada persaingan antara air dan pestisida untuk mendapatkan tempat pengikatan di dalam tanah.

Pestisida yang diserap partikel tanah tetap berada di zona akar, membuatnya lebih tersedia bagi tanaman dan lebih rentan terhadap degradasi mikroba dan kimia. Selain itu, pestisida yang terserap ke dalam tanah kecil kemungkinannya untuk menguap atau meresap ke dalam tanah. Partikel tanah tetap berada di zona akar, membuatnya lebih tersedia bagi tanaman dan lebih rentan terhadap degradasi mikroba dan kimia. Selain itu, pestisida yang terserap ke dalam tanah kecil kemungkinannya untuk menguap atau meresap ke dalam tanah (Pathways & Factors, 2023).

Volatilisasi merupakan tahap dimana pestisida berubah dari wujud padat atau cair menjadi gas, sehingga memungkinkan pestisida

dilepaskan melalui migrasi uap (Sharma et al., 2019). Pestisida sering kali lebih rentan terhadap penguapan di tanah berpasir, basah dan dilingkungan panas, kering dan berangin (Pathways & Factors, 2023). Selain itu keberadaan residu pestisida di dalam tanah ditentukan oleh mekanisme degradasi seperti kerusakan mikroba, reaksi kimia, dan fotodegradasi. (Pathways & Factors, 2023)(M. Kumar et al., 2021). Dekomposisi mikroba adalah pemecah bahan organik oleh mikroorganisme seperti jamur dan bakteri. Selain itu, pestisida dipecah secara kimiawi dengan bereaksi dengan air, oksigen, alkohol, dan zat lain didalam tanah.





Gambar2.4 Proses pemindahan dan penguraian pestisida dalam tanah (Kai et al., 2024)

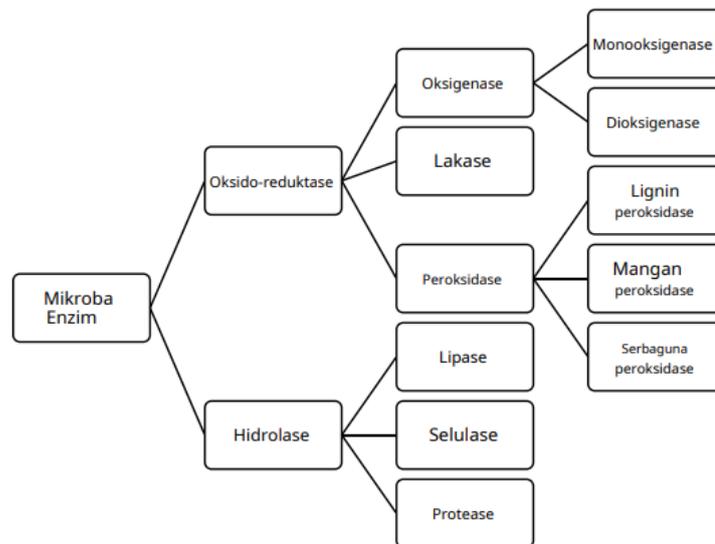
Secara umum sifat senyawa seperti kelarutan dalam air, persistensi, pelindian, mobilitas, dan volalitas (tekanan uap), serta sifat tanah seperti jenis tanah sangat mempengaruhi nasib pestisida di lingkungan (Skendži et al., 2021). Mobilitas pestisida merupakan faktor penting yang mempengaruhi penyebaran pestisida ke seluruh lokasi aplikasi. Pestisida bereaksi secara berbeda setelah digunakan tergantung pada lingkungannya. Misalnya, (1) pestisida dapat menempel pada matriks tanah, tumbuh-tumbuhan, dan permukaan lainnya, serta tetap berada di dekat lokasi pengendapan dan permukaan lainnya serta tetap berada didekat Lokasi pengendapan. (2) Mereka menempel pada partikel tanah dan bergerak bersama tanah yang terkikis oleh limpasan atau angin. (3) larut dalam air dan diserap tanaman atau meresap kedalam tanah. (4) terbawa ke udara melalui penguapan atau erosi angin dari tanah (Pathways & Factors, 2023).

Ketahanan merupakan salah satu sifat penting pestisida yang menentukan nasibnya di lingkungan. Waktu paruh merupakan indikator stabilitas suatu senyawa. Waktu paruh yang lebih panjang menunjukkan potensi migrasi pestisida yang lebih tinggi. Pestisida dengan waktu paruh yang kurang dari 30 hari sering dianggap non-persisten, sedangkan pestisida dengan waktu paruh lebih dari 100 hari dianggap persisten (Pathways & Factors, 2023). Pestisida yang sangat persisten dipecah secara mikrobiologi, kimia, atau fotokimia. Salah satu pestisida yang paling persisten adalah insektisida OC, yang dapat bertahan di tanah hingga satu tahun (Jankiewicz, 2023).

Kimia pestisida distribusi antara daun dan tanah, faktor lingkungan seperti pH, suhu dan aktivitas mikroba adalah beberapa faktor penting yang mempengaruhi proses (Skendzi et al., 2021)(Pathways & Factors, 2023), artinya ketika pestisida dilepaskan ke lingkungan, pestisida cenderung berpindah didalam lokasi aplikasi dan dapat menyebar ke luar lokasi, sehingga mencapai area dan organisme yang bukan target (Eapen et al., 2007). Kekhawatiran muncul mengenai efek jangka panjang pestisida karena pestisida cenderung meresap dari lokasi aplikasi dan membahayakan sumber daya dan organisme target (Skendzi et al., 2021)(Eapen et al., 2007). Mengingat penggunaan pestisida tidak dapat dihindari, pestisida sulit dikendalikan, dan pestisida dapat menyebabkan kerusakan biologis, pemulihan kontaminasi pestisida dianggap perlu.

2.3 Enzim metabolisme pestisida dan sumbernya

Jamur dan akteri menghasilkan enzim ekstraseluler yang terakumulasi didalam tanah dan menyebabkan degradasi polutan. Misalnya lakase, lignin eroksidase, dan mangan peroksidase yang dilepaskan ke lingkungan oleh hifa jamur. Selain itu, oksireduktase dan hydrolase merupakan kelompok enzim yang paling banyak dipelajari dari berbagai mikroorganisme.



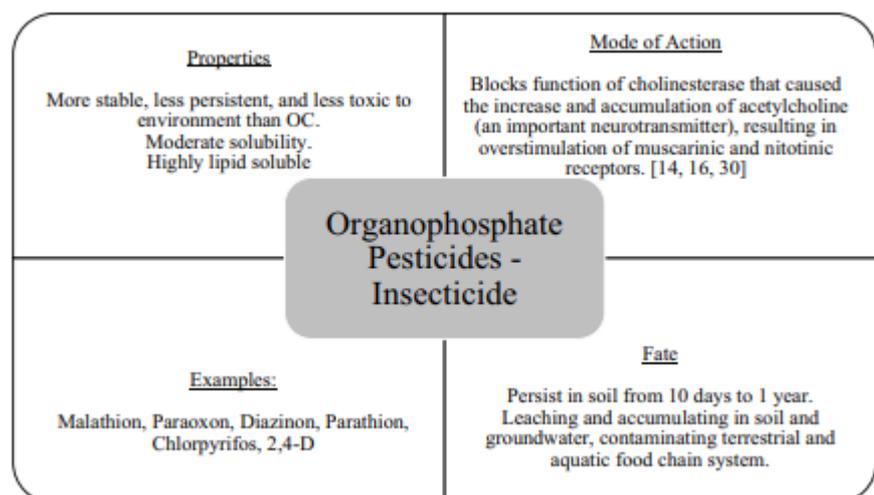
Gambar 2.5 Kelompok enzim oksidasi, reductase, dan hydrolase dari mikroba (Latip et al., 2021)

Reaksi hidrolisis, oksidasi dan reduksi memecah pestisida menjadi zat kimia. Penggunaan teknik omik tingkat lanjut telah menjelaskan dasar genetik dan proteomik dari jalur metabolisme ini sehingga memungkinkan produksi jamur hasil rekayasa genetika dengan

kemampuan degradasi yang lebih baik. Jamur merupakan agen bioremediasi yang berharga karena jalur metabolisme dan aktivitas enzimatisnya yang beragam yang memfasilitasi biodegradasi kontaminan (Pujiati, 2024).

a. Organofosfat (OP)

Telah didokumentasikan bahwa insektisida pestisida organofosfat menyumbang sekitar 50% dari beban insektisida global. Penggunaan senyawa pestisida organofosfat secara luas sebagai pengganti senyawa organoklorin yang sangat beracun dalam pestisida dan telah menyebabkan kontaminasi tanah (Jankiewicz, 2023). Mereka beracun dan persisten dan dapat terakumulasi di lingkungan sehingga menyebabkan keracunan dan merusak lingkungan (Jankiewicz, 2023).



Gambar 2.6 Sifat, cara kerja, Nasib, dan contoh insektisida organofosfat

Gambar diatas menggambarkan sifat, mekanisme aksi, perilaku dan senyawa representative insektisida organofosfat. Pestisida ini menyebabkan polusi lingkungan yang serius terhadap tanah dan air. Keracunan OP disebabkan oleh pengikatan ireversibel bahan kimia OP ke asetilkolinesterase (AChE) dan menghambat aktifitas enzimnya. AChE merupakan enzim kunci dalam sistem saraf organisme, yang bertanggung jawab untuk mengganggu transmisi sinaptik untuk menghindari aktivitasi neuron berkelanjutan diterminal saraf (Kai et al., 2024).

Meskipun AChE tidak mampu mendegradasi senyawa OP, telah dilaporkan bahwa katalis enzim yang ditemukan pada spesies mikroba dapat mendegradasi senyawa OP (Jankiewicz, 2023). Senyawa OP menjadi kurang berbahaya Ketika salah satu dari tiga ikatan ester pada tulang punggungnya dibelah. Mekanisme degradasi memerlukan oksidasi atau reduksi diikuti oleh hidrolisis.

Serangkaian proses degradasi menyebabkan pembelahan cincin membuka molekul OP dan melepaskan sekelompok senyawa tertentu untuk metabolisme lebih lanjut melalui dikatalis enzim. Produk yang dihasilkan memasuki siklus TCA (asam trikarboksilat) dan sepenuhnya digunakan dalam metabolisme melepaskan CO₂ dan H₂O sebagai produk akhir.

b. Organofosfat hydrolase (OpdA)

OpdA merupakan salah satu enzim pendegradasi organofosfat yang paling efisien yang diisolasi dari *Agrobacterium radiobacter*, bakteri saprofit yang hidup di tanah pertanian. Enzim organofosfat hydrolase memiliki inti logam Fe-Zn heterodinuklir. Enzim ini memiliki struktur barel dan penambahan kobalt yang meningkatkan laju dekomposisi spesifik. Aktifitas enzim OpdA terbukti mampu menghidrolisis berbagai jenis pestisida organofosfat, termasuk klorpirifos, diazinon, diklorvos, dimetoat, malathion, metil parathion, dan etil parathion (Perpetuini et al., 2023). Sebagai contoh insektisida organofosfat dihidrolisis oleh fosfotriesterase. Organofosfat hydrolase untuk menghasilkan dietiltiofosfat dan 2-isopropil-4-metilpirimidin-6-ol (Ukalska-jaruga et al., 2023).

c. Fosfotriesterase (PTE atau OPH)

Telah dilaporkan bahwa enzim lain PTE atau OPH dapat menghidrolisis senyawa OP dengan memutus ikatan antara PO dan PS (Perpetuini et al., 2023). Enzim ini mempunyai aktivitas katalitik tertinggi terhadap berbagai pestisida organofosfat dan laju katalitik tercepat diantara semua enzim pendegradasi pestisida organofosfat. PTE pertama kali diidentifikasi pada bakteri tanah yang menghidrolisis parathion (Perpetuini et al., 2023). Berbeda dari

hydrolase lainnya karena mereka membutuhkan logam divalent untuk mekanisme katalitiknya (Chi et al., 2021).

Enzim PTE berbentuk tong dan memiliki struktur protein tersier. Enzim-enzim ini berasal dari bakteri yang bergantung pada seng dan termasuk dalam superfamily amihidrolase. Enzim PTE berikatan silang dengan fibril amyloid yang disintesis oleh insulin dan kristalin, stabilitas termalnya meningkat. Lebih jauh lagi, Breger et al. menunjukkan bahwa pengikatan PTE melalui koordinasi afinitas logam pada antarmuka bahan skala nano, titik kuantum semikonduktor (QD), meningkatkan efisiensi kinetik fosfotriesterase sebanyak dua kali lipat, yang mengarah pada peningkatan aktivitas enzim dan menemukan korelasi (Chi et al., 2021).

3. Molecular Docking

Bidang penelitian dalam bioinformatika saat ini adalah docking molekuler. Docking molekuler adalah metode berbasis genetika yang dapat digunakan untuk menemukan pola interaksi yang paling sesuai antara dua molekul: reseptor dan ligan. Ligan sendiri adalah molekul sinyal kecil yang terlibat dalam proses anorganik dan biokimia. Tujuan dari docking molekuler adalah untuk meniru peristiwa interaksi antara molekul dan protein target dalam pengujian *in vitro* (Setiawan et al., 2017).

Docking molekuler dapat diklasifikasikan menjadi tiga kategori berdasarkan fleksibilitas molekul: docking kaku, docking semifleksibel, dan docking fleksibel. Tujuan dari docking adalah untuk mencapai konformasi optimal antara protein dan ligan. Docking membantu dalam mempelajari interaksi obat atau ligan atau reseptor atau protein dengan mengidentifikasi lokasi aktif yang sesuai pada protein dan memperoleh geometri optimal kompleks ligan-reseptor. Docking adalah dasar penemuan obat melalui simulasi beebatuan computer. Langkah pertama dalam desain obat komputasional adalah menemukan tempat pengikatan ligan suatu protein (Setiawan et al., 2017).

Dengan semakin banyanya struktur biologi molekuler yang tersedia, pendekatan docking telah menjadi alat yang sangat berharga dan berguna dalam penemuan dan pengembangan obat rasional berbasis struktur. Untuk reseptor protein dengan struktur tiga dimensi yang diketahui, masalah penggabungan ligan-protein pada dasarnya melibatkan situs aktif protein. Berbagai metode komputasi telah dikembangkan untuk menentukan struktur dan fungsi protein (Setiawan et al., 2017).

Studi penambatan molekuler mengevaluasi mode pengikatan suatu molekul ke kantong pengikatan molekul lain berdasarkan energi pengikatan least. Pengikatan molekul kecil atau ion atau partikel disebut ligan ke biomolekul disebut makromolekul, reseptor, atau target adalah studi komputasi umum dalam proses interaksi nonkovalen numerik.

Prediksi hasil docking antara protein dan ligan yang akurat dan andal berguna dalam desain obat berbasis struktur modern (Meng XY, Zhang HX, Mezei M, Cui M 2011) .

Molecular docking bertujuan mengatur kekuatan dan interaksi afinitas antar molekul. Kekuatan afinitas interaksi yang antar dua molekul menghasilkan suatu nilai yang mana dapat menjelaskan energi total pengikatan protein dengan ligand. Nilai kompleks protein-ligan akan semakin stabil jika semakin kecil sehingga ligan (senyawa) semakin poten (Siagian et al., 2022). Peningkatan efektivitas pada upaya pengembangan obat dapat dibantu dengan metode uji in silico. Keuntungan uji in silico sebagai salah satu metode penemuan baru senyawa, yaitu dapat memprediksi, menunjang efisiensi aktivasi senyawa induk dan juga dapat memberikan sebuah hipotesis dalam pengembangan obat dan terapi (Nurhikmah, 2021).

Ada banyak aplikasi teknik docking molekuler, yaitu prediksi energi pengikatan bebas terendah, struktur kompleks reseptor-ligan yang ideal, pengikatan diferensial suatu ligan ke reseptor makromolekul yang berbeda, geometri kompleks stabil reseptorligan, usulan modifikasi molekul timbal menjadi meningkatkan efisiensinya dalam berikatan dengan reseptor dan bertindak bersama-sama dalam melakukan suatu tugas, merancang kandidat molekul secara de novo berdasarkan studi docking dan desain perpustakaannya, mempelajari efek samping dari suatu molekul kandidat karena interaksinya dengan

molekul lain, interaksi suatu molekul dengan molekul obat potensial dengan protein homolog, memahami interaksi protein-protein (PPI), menetapkan peran diduga pada protein yang tidak diketahui, memahami hubungan antara protein yang membentuk kompleks stabil multimolekul seperti proteasome (Abdelsattar AS, Dawoud A, Helal MA 2021).

Studi interaksi molekuler untuk memahami berbagai jalur biologis sejumlah interaksi dilakukan oleh banyak biologis molekuler dalam sel yang menghasilkan biomolekul tertentu lainnya dan mencapai fungsi biologis berbeda dalam sel dan prediksi polutan yang terdegradasi oleh enzim, dan lainnya. Teknik docking juga digunakan secara luas untuk menyelidiki aplikasi fabric nano di berbagai bidang. Nanopartikel adalah partikel koloid padat (ukuran bervariasi dari 10 hingga 1000 nm) yang memiliki sifat, seperti peningkatan rasio permukaan terhadap volume, daya tarik untuk partikel berukuran lebih besar, stabilitas kimia, non-toksisitas, biokompatibilitas, magnetisasi saturasi tinggi dan kerentanan magnetik tinggi, dll. Sifat-sifat ini menyebabkan penggunaannya yang bermanfaat dalam pengobatan antibiotik, antimikroba (antivirus, antibakteri, antifouling, antijamur), pelapis nanokomposit, katalis, dan pelumas sehingga diperlukan dalam aplikasi biomedis seperti pemberian obat yang ditargetkan, hipertermia, terapi fotoablasi, bioimaging, biosensor, pelabelan sel, dan pengiriman gen, dll. Banyak penelitian docking telah dilakukan untuk memahami

interaksi molekuler antara biomolekul dan nanopartikel anorganik atau organik (sintetis/alami) karena penggunaannya dalam aplikasi biomedis (Abdelsattar AS, Dawoud A, Helal MA 2021).

B. Kajian Penelitian yang Relevan

1. Bioremediasi pestisida dalam bahan pangan yang terkontaminasi menggunakan probiotik telah menarik perhatian besar dalam beberapa tahun terakhir, tetapi beberapa produk antara mungkin memiliki efek mendalam pada toksisitas makanan yang diolah. (Yuan et al., 2021)
2. Beberapa spesies *Tricoderma* dapat mengubah xenobiotik menjadi senyawa tidak beracun, isalnya pestisida seperti diklorvos, polutan sianida dan bahkan logam berat (Escudero-Leyva et al., 2022).
3. Teknologi bioinformatika termasuk molecular docking membantu memahami mekanisme enzimatik dalam biodegradasi. Studi oleh (Gupta et al., 2021) menunjukkan bahwa simulasi in-silico dapat mengidentifikasi interaksi spesifik antara enzim mikroba dan polutan organik, sehingga mempercepat seleksi mikroorganisme yang potensial.
4. Studi oleh (M et al., 2018) Menemukan bahwa molecular docking dapat memprediksi ikatan antara enzim fosfatase dari kapang dengan pestisida organofosfat seperti chloryrifos dan parathion. Hal ini membantu dalam seleksi kapang yang memiliki poten degradasi tinggi.

C. Kerangka Berpikir

Chlorpyrifos sebagai salah satu pestisida organofosfat, banyak digunakan dalam bidang pertanian namun memiliki dampak negatif terhadap lingkungan dan kesehatan manusia. Penggunaan klorpirifos yang berlebihan dapat menyebabkan akumulasi residu beracun di tanah dan air, yang sulit terurai secara alami. Oleh karena itu, diperlukan upaya inovatif untuk mengatasi masalah ini, salah satunya melalui biodegradasi menggunakan mikroorganisme seperti kapang *Aspergillus niger*.

Kapang *Aspergillus niger* memiliki enzim yang mampu mendegradasi senyawa organik kompleks, termasuk organofosfat seperti diazinon. Potensi ini menjadikan *Aspergillus niger* menarik untuk diteliti lebih lanjut dalam konteks penguraian diazinon. Namun, belum banyak riset yang secara mendalam memetakan interaksi molekuler antara enzim dari kapang ini dengan pestisida organofosfat. Molekuler docking adalah metode simulasi komputer yang dapat memprediksi interaksi molekuler antara ligan (chlorpyrifos) dan protein target (enzim kapang *Aspergillus niger*). Teknik ini memungkinkan peneliti untuk memahami mekanisme pengikatan dan afinitas antara keduanya secara lebih efisien dan ekonomis dibandingkan eksperimen laboratorium.

Hasil riset yang sistematis dan terstruktur perlu disajikan dalam format yang mudah diakses, seperti e-monograf. E-monograf ini tidak hanya mencakup hasil simulasi molekuler docking, tetapi juga informasi biologis

dan ekologi *Aspergillus niger* , potensi aplikasinya, serta kontribusi terhadap pengelolaan limbah pestisida.

