

SKRIPSI

**MEMBANGUN PROTOKOL *STRUCTURE-BASED VIRTUAL
SCREENING* (SBVS) UNTUK IDENTIFIKASI KANDIDAT
LIGAN ANTI-HIPERLIPIDEMIA**



OLEH:

DESTI KURNIA SARI

214820103006

**FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
PROGRAM STUDI S1 FARMASI
UNIVERSITAS AISYIAH PALEMBANG**

2025

**MEMBANGUN PROTOKOL *STRUCTURE-BASED VIRTUAL
SCREENING* (SBVS) UNTUK IDENTIFIKASI KANDIDAT
LIGAN ANTI-HIPERLIPIDEMIA**

**Skripsi ini Diajukan sebagai
Salah Satu Syarat untuk Memperoleh Gelar
Sarjana Farmasi (S.Farm)**



**OLEH :
DESTI KURNIA SARI
214820103006**

**FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
PROGRAM STUDI SI FARMASI
UNIVERSITAS AISYIAH PALEMBANG**

2025

LEMBAR PERSETUJUAN
SKRIPSI
MEMBANGUN PROTOKOL *STRUCTURE-BASED VIRTUAL*
***SCREENING* (SBVS) UNTUK IDENTIFIKASI KANDIDAT**
LIGAN ANTI-HIPERLIPIDEMIA

Oleh:

Desti Kurnia Sari
214820103006

Dosen Pembimbing:

I. Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M. Farm
NIK. 2015.09.057



II. Suprayetno, S.Si., MT
NIK. 2015.10.075 .



Mengetahui,
Ketua Program Studi S1 Farmasi



Ast. Onny-Indriani, M.Farm
NIK. 2014.10.025

LEMBAR PENGESAHAN
SKRIPSI
MEMBANGUN PROTOKOL *STRUCTURE-BASED VIRTUAL*
***SCREENING* (SBVS) UNTUK IDENTIFIKASI KANDIDAT LIGAN**
ANTI-HIPERLIPIDEMIA

Oleh:

Desti Kurnia Sari
214820103006

Telah dipertahankan di depan Tim Penguji pada Tanggal 13 Agustus 2025

Dosen Penguji :

I. Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M.Farm
NIK. 2015.09.057

()

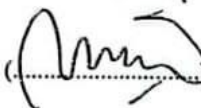
II. Suprayetno, S.Si., MT
NIK. 2015.10.075

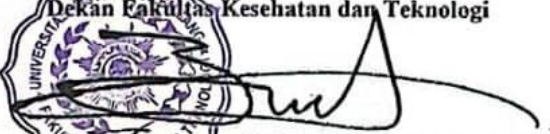
()

III. Ade Oktasari, S.Si. M.Sc
NIK. 198810072023212040

()

IV. Apt. Onny Indriani, M.Farm
NIK. 2014. 10.025

()

Disahkan Oleh,
Dekan Fakultas Kesehatan dan Teknologi

Ns. Miming Oxyandi, S.Kep. M.Kes. M.Kep. Ph.D
NIK. 2016.03.022

PERSEMBAHAN DAN MOTTO

Motto:

- ❖ *“Allah tidak membebani seseorang melainkan sesuai dengan kesanggupannya” (QS Al Baqarah:286)*

Persembahan:

- ❖ Kedua orang tua tercinta yang selalu mendoakan dan mensupport saya dalam penyusunan proposal skripsi ini, kerja keras yang kalian lakukan untukku tidak akan pernah terlupakan, kata terima kasih saja tidak akan cukup untuk perjuangan yang kalian lakukan untuk putri tercintamu ini, terima kasih cinta, kepercayaan, dan kasih sayang yang kalian berikan untuk putrimu ini. Maka saya persembahkan skripsi ini kepada kalian sebagai tanda bahwa kerja keras yang selama ini kalian lakukan tidaklah sia-sia.
- ❖ Kakak- kakakku, ayuk ipar beserta keponakan saya yang lucu terima kasih telah menjadi penyemangat dan bantuan kalian selama ini.
- ❖ Dan untuk pembimbing saya bapak Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M. Farm dan bapak Suprayetno, S.Si., MT. Saya ucapkan beribu-ribu terima kasih atas bimbingan, saran, motivasi kalian, yang tidak akan saya lupakan dan terima kasih telah menjadi pembimbing yang terbaik yang tidak pernah meninggalkan anak bimbingannya seorang diri dalam menghadapi masalah yang terjadi.

SURAT PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama Mahasiswa : Desti Kurnia Sari
Nomor Iduk Mahasiswa : 214820103006
Program Studi : S1 Farmasi
Judul Skripsi : Membangun Protokol *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) untuk Identifikasi Kandidat Ligan Anti-Hiperlipidemia

Dengan ini menyatakan skripsi yang saya buat adalah asli karya saya sendiri bukan plagiat karena kesalahan saya sendiri maka saya bersedia diberi sanksi apapun oleh Universitas Aisyiyah Palembang. Saya tidak akan menuntut pihak manapun atas perbuatan saya tersebut.

Demikianlah surat pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya dan dalam keadaan sehat.

Palembang, 13 Agustus 2025

Yang membuat pernyataan



Desti Kurnia Sari
NIM. 214820103006

HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai sivitas Universitas Aisyiyah Palembang saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Desti Kurnia Sari
Nim : 214820103006
Proram Studi : S1 Farmasi
Jenis Karya : Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Aisyiyah Palembang Hak Bebas Royalti Non Ekklusif (Non-Exclusive Royalty-Free Right) atas skripsi yang berjudul “Membangun Protokol *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) untuk Identifikasi Kandidat Ligan Anti-Hiperlipidemia” beserta perangkat yang ada jika diperlukan. Dengan Hak Bebas Royalti Non Ekklusif ini Universitas Aisyiyah berhak menyimpan data (database), merawat dan mempublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai pemilik Hak Cipta. Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya,

Dibuat di : Universitas Aisyiyah Palembang
Pada tanggal : 13 Agustus 2025

Yang menyatakan



Desti Kurnia Sari
NIM. 214820103006

RIWAYAT HIDUP



IDENTITAS DIRI

Nama : Desti kurnia Sari
Nim : 214820103006
Tempat/Tanggal lahir : Bailangu/12 Desember 2002
Jenis Kelamin : Perempuan
Agama : Islam
Kewarganegaraan : Indonesia
Alamat : Palembang, Sukarami km 9, Jln Kebun Bunga
Komplek Griya Anggrek 99 No 02
No. Telpon : 089684333063

RIWAYAT PENDIDIKAN

2009-2015 : SD Sungai Guci
2015-2018 : SMP Negeri 55 Palembang
2018-2021 : SMK Negeri 2 Palembang
2021-Sekarang : Universitas Aisyiyah Palembang

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah *rabbi'l'amin*, puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat serta karunia-Nya, sehingga saya dapat menyelesaikan proposal skripsi dengan judul “Membangun Protokol *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) untuk Identifikasi Kandidat Ligan Anti-Hiperlipidemia”.

Penyusun proposal skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak, oleh karena itu bersama ini perkenalkanlah saya mengucapkan terima kasih sebesar-sebesarnya kepada:

1. Bapak Khoirin, SKM., M.Kes., selaku Rektor Universitas Aisyiyah Palembang.
2. Bapak Ns. Miming Oxyandi, S.Kep, M.Kes, M.Kep, Ph.D, selaku Dekan Universitas Aisyiyah Palembang.
3. Ibu apt. Onny Indriani, M.Farm., selaku Ketua Program Studi S1 Farmasi Universitas Aisyiyah Palembang.
4. Bapak Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M Farm., sebagai pembimbing 1 yang telah memberikan bimbingan dan masukan dalam penyusunan proposal skripsi ini.
5. Bapak Suprayetno, S.Si, M.T., sebagai dosen pembimbing II yang telah meluangkan waktu untuk membimbing dan memberi masukan dalam penyusunan proposal skripsi ini.
6. Ibu Yudi Arina, M.Kes, selaku pembimbing akademik yang selalu memberikan bimbingan selama masa studi.
7. Bapak dan Ibu dosen Universitas Aisyiyah Palembang yang telah memberikan bekal ilmu sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini.
8. Kedua orang tua tercinta, kakak- kakakku, ayuk ipar beserta keponakan saya yang lucu terima kasih telah menjadi penyemangat dalam menyusun skripsi ini
9. Untuk teman-teman penelitian kimia komputasiku Thoria, Novitria, Izzaty, Risna dan Vika, terima kasih atas segala kerja sama dan bantuan selama penelitian ini.
10. Seluruh teman-teman seperjuangan angkatan 2021 yang sudah berjuang

1
1

10. Seluruh teman-teman seperjuangan angkatan 2021 yang sudah berjuang bersama-sama udengan saya selama 4 tahun, suka duka sudah kita lewati bersama, terima kasih sudah memberikan semangat dan menguatkan satu sama lain

11. Untuk diri sendiri, terima kasih karena telah mau berjuang dan bertahan sampai saat ini hingga mampu berada pada titik ini.

Saya telah berusaha menyelesaikan proposal skripsi ini dengan sebaik mungkin, saya menyadari skripsi ini tidak luput dari berbagai kekurangan, saya berharap semoga skripsi ini berguna bagi pembaca.

Palembang,¹³ Agustus 2025



Desti Kurnia Sari

**UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG
PROGRAM STUDI FARMASI**

Skripsi, September 2025

Desti Kurnia Sari

**Membangun Protokol *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) untuk
Identifikasi Kandidat Ligan Anti-Hiperlipidemia**

LXI, 56 Halaman, 4 Tabel, 11 Gambar, 13 Daftar Singkatan, 8 Lampiran

ABSTRAK

Latar Belakang: Hiperlipidemia merupakan salah satu faktor risiko utama penyakit kardiovaskular yang menjadi penyebab kematian terbanyak di Indonesia, yaitu sebesar 35%. Prevalensi hiperlipidemia secara global mencapai 45%. Minimnya gejala klinis pada pasien hiperlipidemia menyebabkan deteksi dini yang kurang baik, sehingga diperlukan upaya untuk mencari alternatif pengobatan yang lebih efektif. Salah satu pendekatan yang saat ini tengah berkembang adalah penemuan obat berbasis bahan alam dengan bantuan studi komputasional (*in silico*), seperti *network pharmacology*, *molecular docking*, dan *molecular dynamics*. **Tujuan:** Untuk mengetahui potensi senyawa aktif obat pemandu dalam menemukan reseptor yang tepat untuk hipertensi menggunakan pendekatan Farmakologi Jaringan, untuk mengetahui interaksi senyawa aktif obat pemandu dengan situs aktif reseptor dalam protokol SBVS. **Metode:** Penelitian ini dilakukan secara *in silico* menggunakan *network pharmacology*, *molecular docking*, dan *molecular dynamic*. **Kesimpulan:** Berdasarkan penelitian yang dilakukan, dapat disimpulkan bahwa Rosuvastatin membentuk interaksi langsung dengan residu Lys691, situs kritis dalam protein reduktase HMG-CoA (1hwl). Energi potensial sistem juga menunjukkan stabilitas tanpa fluktuasi besar yang menunjukkan perubahan struktural besar selama simulasi. Nilai energi pengikatan bebas yang dihitung paling stabil pada titik data ke-120, dengan nilai -7,1590, dikodekan sebagai 1hwl00120.

Kata kunci: hiperlipidemia, *network pharmacology*, *molecular docking*, *molecular dynamic*.

Daftar pustaka: LIII (53) (2011-2025)

UNIVERSITY OF AISYIYAH PALEMBANG
STUDY PROGRAM OF PHARMACY

Thesis, September 2025

Desti Kurnia Sari

**Establishing a Structure-Based Virtual Screening (SBVS) Protocol for
Identification of Anti-Hyperlipidemic Ligand Candidates**

LXI, 56 Pages, 4 Tables, 11 Figures, 13 Abbreviations, 8 Appendices

ABSTRACT

Background: Hyperlipidemia is a major risk factor for cardiovascular disease, which is the leading cause of death in Indonesia, accounting for 35%. The prevalence of hyperlipidemia globally reaches 45%. The lack of clinical symptoms in hyperlipidemia patients leads to poor early detection, necessitating efforts to find more effective treatment alternatives. One currently developing approach is the discovery of natural-based drugs with the aid of computational studies (in silico), such as network pharmacology, molecular docking, and molecular dynamics.

Objectives: To find out the potential of active compounds of guide drugs in finding the right receptors for hypertension using the Network Pharmacology approach, to find out the interaction of active compounds of guide drugs with the active site of the receptor in the SBVS protocol. **Methods:** This study conducted in silico tests using network pharmacology, molecular docking, and molecular dynamic.

Conclusion: Based on the research conducted, it can be concluded that Rosuvastatin forms a direct interaction with the Lys691 residue, a critical site in the HMG-CoA reductase protein (1hwl). The potential energy of the system also shows stability without any major fluctuations indicating major structural changes during the simulation. The calculated free binding energy value is most stable at the 120th data point, with a value of -7.1590, coded as 1hwl00120.

Key words: hyperlipidemia, network pharmacology, molecular docking, molecular dynamic.

Bibliography: LIII (53) (2011-2025)

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PERSETUJUAN	iii
LEMBAR PENGESAHAN	iv
LEMBAR PERSEMBAHAN DAN MOTTO	v
RIWAYAT HIDUP	vi
SURAT PERNYATAAN	vii
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI	viii
KATA PENGANTAR	ix
ABSTRAK	xi
ABSTRACT	xii
DAFTAR ISI	xiii
DAFTAR TABEL	xv
DAFTAR GAMBAR	xvi
DAFTAR SINGKATAN	xvii
DAFTAR LAMPIRAN	xviii
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	2
C. Tujuan Penelitian	2
D. Manfaat Penelitian	2
E. Ruang Lingkup dan Batas Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI	4
A. Tinjauan pustaka	4
1. Hiperlipidemia	4
2. Senyawa penuntun	6
a. Atorvastatin	6
a. Rosuvastatin	7
b. Niasin	7

c. Gemfibrozil.....	8
d. Bezafibrate.....	9
3. Kimia komputasi	10
a. Network pharmacology	10
b. Molecular docking.....	11
c. Molecular Dynamics	11
B. Landasan teori	12
BAB III METODE PENELITIAN.....	15
A. Desain penelitian	15
B. Waktu dan tempat penelitian	15
C. Alat dan bahan.....	15
D. Prosedur penelitian	16
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	20
A. Network Pharmacology	20
B. Molecular docking.....	24
1. Preparasi reseptor	24
2. Preparasi ligan dan running docking	27
C. Molecular dynamic.....	28
1. Analisis Molecular Dynamic.....	28
2. Perhitungan nilai RMSD	30
3. perhitungan nilai free binding energy	31
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	32
A. Kesimpulan.....	32
B. Saran.....	32
DAFTAR PUSTAKA	33
LAMPIRAN.....	37

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Nama dan golongan obat senyawa penuntun.....	20
Tabel 4.2 Data bioaktivitas potensial senyawa yang terkandung pada obat Hiperlipidemia	21
Tabel 4.3 hasil prediksi reseptor pada penyakit anti-hiperlipidemia	22
Tabel 4.4. Interaksi residu asam amino pada reseptor 1hwl.....	24

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur Atorvastatin	6
Gambar 2.2 Struktur Rosuvastatin	7
Gambar 2.3 Struktur Asam Nikotinat.....	8
Gambar 2.4 Struktur Gemfibrozil.....	9
Gambar 2.5 Struktur Bezafibrate.....	10
Gambar 3.1 Alur prosedur penelitian	19
Gambar 4.1 Diagram Venn	23
Gambar 4.2 Reseptor 1hwl yang belum dimurnikan.....	25
Gambar 4.3 Reseptor 1hwl yang sudah dimurnikan.....	26
Gambar 4.4 Grid box 3D.....	26
Gambar 4.5 Salah satu struktur senyawa.....	27
Gambar 4.6 Salah satu struktur senyawa penuntun untuk docking.....	27
Gambar 4.7 Grafik total energi potensial sistem	28
Gambar 4.8 <i>Potential energy components</i>	29
Gambar 4.9 Asam amino reseptor 1hwl00120.....	29
Gambar 4.10 Grafik RMSD Å vs Time (ns)	30
Gambar 4.11 Ikatan hidrogen yang terbentuk dengan Lys 691.....	31

DAFTAR SINGKATAN

ACL	anterior cruciate
ATP	Adenosine triphosphate
CETP	Protein ester tranfer kolesterol
DGAT2	Acyl Coa:1,2-diacylglycerol acyltransferase
HDL	high density lipoprotein
HMG-CoA	3-hidroksi-3-metil-glutaril-koenzim A reduktase
LDL	Low-Density Lipoprotein
PJK	Penyakit Jantung Koroner
PPAR	Reseptor yang diaktifkan oleh proliferasi
SBVS	Struktur base virtual screening
TG	Trigliserida
VLDL	Low-density lipoprotein
WHO	World Health Organization

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Hasil data reseptor target pada obat	39
Lampiran 2. Perintah docking pada YASARA	49
Lampiran 3. Perintah md_runmembrane	50
Lampiran 4. Perintah md_convert-sim2pdb.mcr	52
Lampiran 5. Perintah md_analyze.mcr	53
Lampiran 6. Nilai RMSD bb	54
Lampiran 7. Perintah BEcalculation.mcr	55
Lampiran 8. Mengambil nilai terendah dengan ubuntu	56