

**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)