

SKRIPSI
IDENTIFIKASI LIGAN ANTI-HIPERTENSI BERBASIS BAHAN ALAM
YANG DISEBUTKAN DALAM AL-QURAN DAN HADITS DENGAN
METODE *STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING* (SBVS)
PADA TARGET RESEPTOR ACE



OLEH :
IZZATY PARDA MUNIROH
214820103013

PROGRAM STUDI S1-FARMASI
FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS AISYIAH PALEMBANG
2025

SKRIPSI
IDENTIFIKASI LIGAN ANTI-HIPERTENSI BERBASIS BAHAN ALAM
YANG DISEBUTKAN DALAM AL-QURAN DAN HADITS DENGAN
METODE *STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING* (SBVS)
PADA TARGET RESEPTOR ACE

Skripsi ini Diajukan Sebagai Salah Satu
Syarat Untuk Memperoleh Gelar
Sarjana Farmasi (S.Farm)



OLEH :
IZZATY PARDA MUNIROH
214820103013

PROGRAM STUDI SI FARMASI
FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS AISYIAH PALEMBANG
2025

LEMBAR PERSETUJUAN
SKRIPSI
IDENTIFIKASI LIGAN ANTI-HIPERTENSI BERBASIS BAHAN ALAM
YANG DISEBUTKAN DALAM AL-QURAN DAN HADITS DENGAN
METODE *STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING* (SBVS)
PADA TARGET RESEPTOR ACE

Oleh :
Izzaty Parda Muniroh
214820103013

Dosen Pembimbing

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


(.....)

II. Dr. Amrullah, M.Pd.I.
NIK. 198503282020121001


(.....)

Mengetahui,
Ketua Program Studi S1 Farmasi


Apt. Onny Indriani, M.Farm
NIK. 2014.10.025

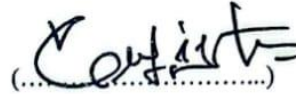
LEMBAR PENGESAHAN
SKRIPSI
IDENTIFIKASI LIGAN ANTI-HIPERTENSI BERBASIS BAHAN ALAM
YANG DISEBUTKAN DALAM AL-QURAN DAN HADITS DENGAN
METODE *STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING* (SBVS)
PADA TARGET RESEPTOR ACE

Oleh :
Izzaty Parda Muniroh
214820103013

Telah dipertahankan di depan Tim Penguji pada Tanggal, 14 Agustus 2025

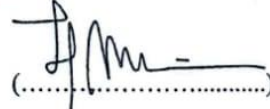
Dosen Penguji

- I. Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M.Farm.
NIK. 2015.09.057
- II. Dr. Amrullah, M.Pd.I.
NIK. 198503282020121001
- III. Deden Mula Saputra, S.Th.I., M.Ud.
NIDN. 2119128805
- IV. Intan Trisakti, M.Farm.
NIK. 2023.11.096

()

()

()

()

Disahkan Oleh,
Dekan Fakultas Kesehatan dan teknologi



Ns. Miming Oxyandi, S.Kep, M.Kes, M.Kep, Ph.D
NIK: 2010.03.022

MOTTO DAN PERSEMBAHAN

MOTTO:

"Allah tidak membebani seseorang melainkan kesanggupannya"

(al-baqarah: 286)

"Perjalanan ini adalah cerita tentang usaha yang tak kenal lelah, tentang doa orang tua yang selalu mengiringi, dan tentang hati yang belajar bersyukur di setiap langkah. Karena di balik setiap keberhasilan, ada ribuan pengorbanan yang tak terlihat."

(Izzaty Parda Muniroh)

PERSEMBAHAN:

Pertama saya ucapkan puji syukur kehadiran Allah SWT atas segala nikmat berupa kesehatan, kekuatan, dan inspirasi yang sangat banyak dalam proses penyelesaian skripsi ini. Shalawat serta salam selalu terlimpahkan pada Nabi Muhammad SAW. Skripsi ini saya persembahkan sebagai bukti semangat dari usahaku serta cinta dan kasih sayangku kepada orang-orang yang sangat berharga dalam kehidupanku.

Keberhasilan dalam penulisan skripsi ini tentunya tidak terlepas dari berbagai bantuan pihak. Oleh karena itu penulis menyampaikan terimakasih kepada:

- ❖ Kedua orang tuaku, ayah Abdul aziz dan ibu Riana terimakasih yang selalu sebagai penuntun arah setiap langkahku, selalu memberikan dukungan kepada putrimu ini untuk selalu semangat dalam menyelesaikan perkuliahan serta doa yang tiada putusnya yang telah diberikan untuk anakmu ini, dan tak terhitung pengorbanan yang telah kalian berikan kepadaku untuk menyelesaikan perkuliahan ini. Skripsi ini mungkin setitik hasil yang

didapatkan tetapi didalam tulisannya penuh cinta dan perjuangan kalian setiap paragraf kalimat yang dibuat.

- ❖ Kepada kakakku dan adikku terima kasih yang selalu memberikan motivasi kepadaku dan selalu support, terimakasih juga sudah membantu dalam skripsian ini yang selalu direpotkan salah satunya cek biyah. Semoga kalian selalu dijaga dalam lindungan Allah swt selalu diberikan kelancaran setiap proses kalian.
- ❖ Dosen Pembimbing Bapak Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M.Farm dan Bapak Dr. Amrullah, M.Pd.I, terimakasih telah senantiasa memberikan bimbingan, arahan dan motivasi serta telah bersedia meluangkan waktu sehingga berjalan dengan lancar dalam penyelesaian skripsi ini.
- ❖ Dosen Penguji Bapak Deden Mula Saputra, S.Th.I., M.Ud dan Ibu Intan Trisakti, M.Farm, terima kasih telah meluangkan waktu dan telah memberikan saran.
- ❖ Temanku sekaligus saudaraku, Novitria nurhasanah walaupun kita tidak sedarah terimakasih sudah bersedia menjadi tempat keluh kesah ku dan selalu memberikan semangat dan motivasi kepada ku. Semoga setiap langkah mu diberikan berkah oleh allah swt dan semoga kita bisa selalu menyambung silaturahmi ini sampai till Jannah.
- ❖ Temanku Ravica syafitri dan Alfina Damayanti, terimakasih atas kebaikannya selama ini dan selalu memberikan dorongan semangat selama ini kepada ku. Semoga setiap proses mu diberikan berkah oleh allah swt.
- ❖ Temanku Fadilla mutia, terimakasih atas kebaikan mu selama ini dan kerjasama dalam perkuliahan serta doa akan kupanjatkan untuk mu semoga kamu selalu dalam lindungan allah swt.
- ❖ Teman-teman farmasi angkatan 2021, terimakasih telah kebersamai selama ini dan terimakasih untuk memori dan cerita-cerita canda dan tawa yang ku dapatkan pada kalian.
- ❖ Diri saya sendiri, sebagai bentuk penghargaan dan rasa syukur atas segala perjuangan, kesabaran dan kerja keras yang telah saya lalui selama proses belajar ini. Terima kasih telah dapat melewati tantangan ini, mengatasi

setiap rintangan dan tetap semangat dalam meraih cita-cita. Semoga apa yang telah saya capai ini menjadi bekal berharga untuk masa depan dan menjadi motivasi untuk terus berkembang menjadi pribadi yang lebih baik lagi.

RIWAYAT HIDUP



IDENTITAS DIRI

Nama Lengkap : Izzaty Parda Muniroh
NIM : 214820103013
Tempat/ Tanggal Lahir : Palembang, 15 September 2002
Jenis Kelamin : Perempuan
Alamat : Komplek Sukajadi indah blok A no.6 Kel. Sukajadi
Kec. Talang Kelapa
Agama : Islam

RIWAYAT PENDIDIKAN

Tahun 2008-2014 : SD Negeri 27 Talang Kelapa
Tahun 2014-2017 : SMP Sandika sukajadi
Tahun 2017-2020 : SMA Sandika sukajadi
Tahun 2021-Sekarang : Universitas Aisyiyah Palembang

SURAT PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan dibawah ini:

Nama Mahasiswa : Izzaty Parda Muniroh
Tempat/Tanggal Lahir : Palembang, 15 September 2002
Jenis Kelamin : Perempuan
Alamat : Komplek Sukajadi indah blok A no.6 Kelurahan
Sukajadi Kecamatan Talang Kelapaa
No. Telepon/HP : 089669016902
Judul Penelitian : Identifikasi Ligan Anti-hipertensi Berbasis
Bahan Alam Yang Disebutkan Dalam Al-
Qur'an Dan Hadits Dengan Metode *Structure-
Based Virtual Screening* (SBVS) Pada Target
Reseptor ACE
Dipublikasikan di : Universitas Aisyiyah Palembang

Dengan ini menyatakan dengan sebenarnya bahwa penelitian ini dibuat sendiri (bukan plagiat). Apabila dikemudian hari saya memberi pernyataan yang tidak benar sehubungan dengan pernyataan diatas, maka saya bersedia dituntut secara hukum.

Palembang, 14 Agustus 2025
Yang membuat pernyataan



Izzaty Parda Muniroh
214820103013

**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI
TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai Universitas Aisyiyah Palembang, saya yang bertanda tangan dibawah ini:

Nama : Izzaty Parda Muniroh

NIM : 214820103013

Program Studi : S1 Farmasi

Jenis Karya : Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Aisyiyah Palembang Hak Bebas Royalti Noneksklusif (*Non-Exclusive Royalty-Free Right*) atas skripsi yang berjudul “ Identifikasi ligan anti-hipertensi berbasis bahan alam yang disebutkan dalam al-Qurán dan hadits dengan metode *structure-based virtual screening* (SBVS) pada target reseptor ACE” beserta perangkat yang ada jika diperlukan. Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Aisyiyah Palembang berhak menyimpan, mengalih media/format-kan mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*) merawat dan mempublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai pemilik Hak Cipta. Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Di buat di : Universitas Aisyiyah Palembang

Pada Tanggal : 14 Agustus 2025

Yang Menyatakan



Izzaty Parda Muniroh

214820103013

KATA PENGANTAR

Assalamu'alaikum. Warahmatullahi. Wabarakatuh.

Alhamdulillah puji syukur kepada Allah SWT, karena berkat rahmat, hidayah, dan karunia-Nya sehingga saya dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Identifikasi Ligan Anti-Hipertensi Berbasis Bahan Alam yang Disebutkan Dalam Al-Qurán Dan Hadits Dengan Metode *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) Pada Target Reseptor ACE”.

Penulis sepenuhnya menyadari bahwa dalam penyusunan skripsi ini tidak akan selesai tanpa bantuan dari berbagai pihak. Karena itu pada kesempatan ini saya ingin mengucapkan terima kasih 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 Fakultas Kesehatan dan Teknologi (FKesT) Universitas Aisyiyah Palembang
3. Ibu apt. Onny Indriani., M.Farm selaku Ketua Prodi S1 Farmasi Universitas Aisyiyah Palembang
4. Ibu Ulik Alta, S.Farm., M.Kes. selaku Dosen Pembimbing akademik, yang telah membimbing dan mendukung penulis selama ini.
5. Bapak Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M.Farm., selaku dosen pembimbing I, yang senantiasa memberikan bimbingan dan memberikan arahan terkait skripsi ini.

6. Bapak Dr. Amrullah, M.Pd.I., selaku dosen pembimbing II, yang senantiasa memberikan bimbingan dan arahan terkait proposal ini.
7. Bapak dan Ibu dosen beserta staff Universitas Aisyiyah Palembang yang telah memberikan bimbingan dan bantuan kepada penulis dalam menyelesaikan skripsi ini.
8. Kedua orang tua saya, ayah abdul aziz muslim dan ibu riana zetha susila yang telah memberikan doa, dorongan dan semangat selama penyusunan skripsi ini.
9. Kakak dan adik saya, yang telah senantiasa memberikan saya semangat dalam pengerjaan skripsi ini.

Saya menyadari skripsi ini tidak luput dari berbagai kesalahan dan kekurangan. Saya mengharapkan banyak kritik dan saran demi kesempurnaan dan perbaikan sehingga akhirnya laporan skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi seluruh pembaca.

Palembang, 14 Agustus 2025



Izzaty Parida Muniroh
214820103013

UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG
FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
PROGRAM STUDI S1 FARMASI

Skripsi, 14 Agustus 2025
Izzaty Parda Muniroh

Identifikasi Ligan Anti-Hipertensi Berbasis Bahan Alam Yang Disebutkan Dalam Al-Qur'an Dan Hadits Dengan Metode *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) Pada Target Reseptor ACE

XIX, 111 Halaman, 4 Tabel, 11 Gambar, 9 Daftar Singkatan, 10 Lampiran

ABSTRAK

Latar Belakang: Bahan alam yang bersumber dari al-Qur'an dan Hadits memiliki khasiat dalam segi kesehatan, metode *Structure-based virtual screening* (SBVS) sebagai metode utama dalam desain obat berbasis komputer, diharapkan pada penelitian ini didapatkan kandidat senyawa obat baru dari bahan alam yang bersumber dalam al-Qur'an dan Hadits sebagai anti-Hipertensi. **Tujuan:** Melakukan validasi protokol dengan simulasi penambatan ulang dan melakukan *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) senyawa-senyawa dalam bahan alam yang disebutkan al-Qur'an dan hadits. **Metode:** Penelitian ini menggunakan validasi reseptor dan *Structure-based virtual screening* dengan perangkat lunak YASARA-Structure. **Hasil:** *Structure-based virtual screening* pada ligan bahan alam yang bersumber dari al-Qur'an dan Hadits terhadap reseptor ACE (kode PDB: 1o86), terdapat pada bahan alam seperti al-qust dengan kode LTS0154111 yang ditandai dengan nilai energi bebas ikatan terendah -13,2000 kka/mol. Hasil analisis ikatan hidrogen yang diidentifikasi bahan alam yang bersumber dalam al-Qur'an dan Hadits terdapat 4 (empat) bahan alam yang memiliki kandidat obat terhadap anti-hipertensi yang berikatan dengan asam amino Lys511 dan His353. **Kesimpulan:** Bahan alam seperti al-qust, jahe, madu dan anggur memiliki potensi pengobatan terhadap penyakit hipertensi.

Kunci: al-Qur'an dan Hadits, Antihipertensi, Kimia Komputasi, SBVS, Penambatan ulang.

Daftar Pustaka: 97 (2007-2025)

**AISYIYAH UNIVERSITY PALEMBANG
FACULTY OF HEALTH AND TECHNOLOGY
BACHELOR OF PHARMACY STUDY PROGRAM**

Skripsi, 14 August 2025

Izzaty Parda Muniroh

Identification of Anti-Hypertensive Ligands Based on Natural Ingredients Mentioned in the Qur'an and Hadith Using the Structure-Based Virtual Screening (SBVS) Method on the ACE Receptor Target

XIX, 111 pages, 4 tables, 11 figures, 9 lists of abbreviations, 10 appendices

ABSTRACT

Background: Natural ingredients sourced from the Qur'an and Hadith have health benefits. Structure-based virtual screening (SBVS) is the primary method used in computer-based drug design. This study aims to identify new drug candidates from natural ingredients sourced from the Qur'an and Hadith as antihypertensive agents. **Objective:** To validate the protocol with re-docking simulations and perform structure-based virtual screening (SBVS) of compounds in natural materials mentioned in the Qur'an and hadith. **Methods:** This study used receptor validation and structure-based virtual screening with YASARA-Structure software. **Results:** Structure-based virtual screening of natural ligands sourced from the Qur'an and Hadith against the ACE receptor (PDB code: 1o86) found in natural materials such as al-qust with code LTS0154111, which is characterized by the lowest bond free energy value of -13.2000 kka/mol. The results of hydrogen bond analysis identified four natural materials sourced from the Qur'an and Hadith that have drug candidates for antihypertension that bind to the amino acids Lys511 and His353. **Conclusion:** Natural ingredients such as al-qust, ginger, honey, and grapes have therapeutic potential for treating hypertension.

Keywords: Qur'an and Hadith, Antihypertensive, Computational Chemistry, SBVS, Re-anchoring.

References: 97 (2007-2025)

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL	ii
LEMBAR PERSETUJUAN	iii
LEMBAR PENGESAHAN.....	iv
LEMBAR PERSEMBAHAN.....	v
DAFTAR RIWAYAT HIDUP.....	viii
SURAT PERNYATAAN	ix
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN	x
KATA PENGANTAR	xi
ABSTRAK	xiii
ABSTRACT	xiv
DAFTAR ISI	xv
DAFTAR TABEL	xvii
DAFTAR GAMBAR	xviii
DAFTAR SINGKATAN	xix
DAFTAR LAMPIRAN	xx
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	5
C. Tujuan Penelitian	5
D. Manfaat Penelitian.....	5
E. Ruang Lingkup	6
BAB II TINJAUAN PUSATAKA DAN LANDASAN TEORI	7
A. Tinjaun Pustaka	7
1. Definisi Hipertensi	7
2. Bahan alam yang tedapat dalam al-Qur'an dan hadits serta	

relevansinya	8
a. Bahan alam yang terdapat dalam al-Qur'an	8
b. Bahan alam yang terdapat dalam Hadits	12
3. Uji <i>In Silico</i>	16
a. Validasi protokol melalui <i>re-docking</i> 1000x	17
b. <i>Structure-Based Virtual Screening</i> (SBVS)	18
4. Aplikasi Database Penunjang	19
a. Ubuntu	19
b. YASARA- <i>Structure</i>	20
c. AutoDock Vina	20
d. <i>Discovery Studio Visualizer</i>	20
e. Workstation	21
B. Landasan Teori	22
BAB III METODE PENELITIAN	25
A. Desain Penelitian	25
B. Waktu dan Tempat Penelitian	25
C. Alat dan Bahan	26
D. Prosedur Kerja	27
E. Pedoman Etika dan Prosedur Penelitian Kajian Al-qur'an dan Hadits dalam Penelitian Farmasi	33
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	38
A. Validasi reseptor	38
1. Menghilangkan membran pada reseptor ACE (Kode PDB:1o86) dan optimasi energi	38
2. Pembuatan <i>Gridbox</i>	40
3. <i>Re-docking</i> 1000x.....	42
B. <i>Structure-based virtual screening</i> (SBVS)	43
1. Pengumpulan referensi bahan alam yang berdasarkan dari al-Qur'an dan Hadits	43
2. Konversi struktur senyawa dalam format SMILE menjadi 3D	50
3. Energi bebas ikatan (<i>Free binding energy</i>) dan analisis ikatan Hidrogen	51
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN	69
A. Kesimpulan	69
B. Saran	69
DAFTAR PUSTAKA	70
LAMPIRAN	81

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Nama dan jumlah struktur senyawa bahan alam berdasarkan referensi al-Qur'an dan Hadits	26
Tabel 4.1 Daftar nama bahan alam dan sumber informasi dalam al-Qur'an ..	45
Tabel 4.2 Daftar nama bahan alam dan sumber informasi dalam Hadits	46
Tabel 4.3 Data energi bebas ikatan	52
Tabel 4.4 Hasil analisis ikatan hidrogen	54

DAFTAR GAMBAR

Gambar 3.1 Alur prosedur penelitian	32
Gambar 4.1 Sebelum penghilangan membran dan sesudah penghilangan membran.....	39
Gambar 4.2 <i>Gridbox</i> pada reseptor ACE	40
Gambar 4.3 Salah satu struktur 3D dari madu dengan kode LTS01677194....	51
Gambar 4.4 Hasil visualisasi interaksi ligan (LTS0134625) pada bahan alam Jahe dengan asam amino pada sisi aktif reseptor	58
Gambar 4.5 Bahan alam Jahe	59
Gambar 4.6 Hasil visualisasi interaksi ligan (LTS0213060) pada bahan alam madu dengan asam amino pada sisi aktif reseptor	61
Gambar 4.7 Lebah madu dan madu yang dihasilkan	62
Gambar 4.8 Hasil visualisasi interaksi ligan (LTS0154111) pada bahan alam al-qust dengan asam amino pada sisi aktif reseptor	64
Gambar 4.9 Bahan alam al-Qust	65
Gambar 4.10 Hasil visualisasi interaksi ligan (LTS0071002) pada Tumbuhan Anggur dengan asam amino pada sisi aktif reseptor	67
Gambar 4.11 Tumbuhan anggur	68

DAFTAR ARTI LAMBANG DAN SINGKATAN

ACE	<i>Angiotensin Converting Enzyme</i>
LBDD	<i>Ligand-Based Drug Design</i>
PDB	<i>Protein Data Bank</i>
RIKESDAS	Riset Kesehatan Dasar
RMSD	<i>Rood Mean Square Deviation</i>
SBVS	<i>Structure-Based Virtual Screening</i>
SMILE	<i>Simplified Molecular-Input Line-entry System</i>
SBDD	<i>Structure-Based Drug Design</i>
WHO	<i>World Health Organization</i>

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Surat Izin Penelitian	81
Lampiran 2. Lembar Bimbingan	82
Lampiran 3. Hasil screening energi ikatan	83
Lampiran 4. Hasil nilai RMSD (<i>Rood mean square devination</i>)	85
Lampiran 5. Perintah dari <i>target_perp.mcr</i>	86
Lampiran 6. Perintah <i>dock_run100x.mcr</i>	87
Lampiran 7. Perangkat lunak YASARA- <i>Structure</i>	88
Lampiran 8. Lotus Natural Product (laman lotus yang sebagai sumber struktur Senyawa bahan alam	89
Lampiran 9. Perangkat lunak <i>Discovery Studio Visualizer</i>	90
Lampiran 10. Pernyataan Selesai Revisi Skripsi	91