

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

XX, 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

XX, 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)