

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



OLEH:
NOVITRIA NURHASANAH
214820103016

PROGRAM STUDI SI FARMASI
FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG

2025

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

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



OLEH :
NOVITRIA NURHASANAH
214820103016

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

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

Oleh:

Novitria Nurhasanah
214820103016

Dosen Pembimbing:

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

(..........)

II. Suprayetno, S.Si., M.T
NIK. 2015.10.075

(..........)

Mengetahui,
Ketua Program Studi S1 Farmasi



apt. Onny Indriani, M.Farm
NIK. 2014.10.025

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

Oleh:

Novitria Nurhasanah
214820103016

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

()

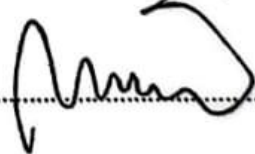
II. Suprayetno, S.Si., M.T
NIK. 2015.10.075

()

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

()

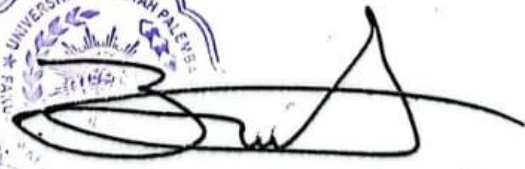
IV. apt. Onny Indriani, M.Farm
NIK. 2014.10.025

()

Disahkan Oleh,

Dekan Fakultas Kesehatan dan Teknologi




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

MOTTO:

“Segala sesuatu memiliki takaran yang sudah ditentukan: “lasy-syamsu yambaghi laha an tudrikal-qamara wa lal-lailu sabiqun-nahar, wa kullun fi falakiy yasbahun” Tidaklah mungkin bagi matahari mengejar bulan dan malam pun tidak dapat mendahului siang. Masing-masing beredar pada garis edarnya”

(QS. Yasin 36; 40)

“Jangan pernah biarkan dirimu menyerah pada keadaan, bahkan saat kamu merasa putus asa. Berusahalah sekuat tenaga untuk menjadi versi terbaik dari dirimu dengan menebarkan kebaikan. Jika langkahmu tersandung, bangkitlah dan mulai lagi. Setiap usahamu tidak akan sia-sia, karena Tuhan selalu menjadi saksi atas setiap benih kebaikan yang kamu tanam”

(Novitria Nurhasanah)

PERSEMBAHAN:

Di antara semua lembar teori dan data, halaman persembahan inilah satu-satunya yang berbicara tulus dari hati. Ia adalah wadah rasa syukur dan pengakuan atas segala pengorbanan. Alhamdulillahirobil'alamin, skripsi ini saya persembahkan sebagai bukti cinta dan terima kasih yang paling mendalam kepada:

- ❖ Superhero dan cinta pertamaku, Ayahanda M. Yusuf terimakasih selalu berjuang untuk kehidupan anakmu terutama putrimu. Motivasi, nasihat, semangat dan doa yang selalu ayah panjatkan. Alhamdulillah kini saya bisa mewujudkan keinginan ayah yang sudah lama direncanakan, ini merupakan awal dari perjalanan karir yang ayah inginkan. Semoga Allah SWT selalu menjaga dan mempermudah setiap langkah ayah serta melimpahkan keberkahan setiap nafasmu.

- ❖ Bidadari dan madrasah pertamaku, Ibunda Fitrianti terimakasih atas segala pengorbanan, doa, motivasi, semangat dan nasihat serta kata-kata yang sering dilontarkan “*Semoga anak ibu jadi orang sukses semua biar bisa bantu banyak orang, tetap rendah hati, sabar, dan ikhlas dalam menjalankan kehidupan. Semoga Allah mempermudah proses kalian*” dan juga tanpa lelah mendukung segala keputusan dan pilihan dalam hidup saya. Terimakasih sudah mempercayai setiap langkah saya semoga Allah SWT selalu menjaga dan mempermudah serta melimpahkan keberkahan disetiap nafasmu.
- ❖ Diriku sendiri, Novitria Nurhasanah terimakasih sudah menjadi gadis hebat, kuat dan penyabar, terimakasih sudah bertahan dititik ini dari tekanan luar biasa, semoga kamu tetap menjadi gadis cantik yang pintar, kuat, hebat, penyabar dan berhati lembut serta selalu melakukan dan memperlakukan dirimu, orangtua, saudara, keluarga dan orang lain dengan kebaikan yang tulus.
- ❖ Saudaraku tercinta, M. Adnan Hakim Junior, M. Yuka Vitrada, M. Habibi Al-Qawiyu terimakasih atas semua pengorbanan, semangat, dorongan, keikhlasan serta kesabaran selama ini tanpa kalian oob belum tentu bisa bertahan dititik ini. Semoga Allah SWT menjaga dan memberkahi setiap langkah kalian serta mempermudah proses kalian mewujudkan semua keinginan kalian. Adikku, hiduplah lebih lama dan tumbuhlah menjadi laki-laki baik, pintar, pekerja keras, bertanggung jawab, penyabar, dan bermanfaat sebagaimana dirimu memperlakukanku serta laki-laki yang selalu mengusahakan kebahagiaan untuk dirimu, orang tua, saudara, keluarga dan orang lain.
- ❖ Kakek dan Nenekku, Kakek Syarifudin, Nenek Dahlia dan Nenek Nurhasani yang ikut terlibat dalam menjaga, melindungi, mengasihi, menyayangi, membahagiakan dan membesarkanku sampai dititik ini. Terimakasih kek, nek sudah sabar dan ikhlas dalam menemani prosesku, semoga kakek dan nenek selalu sehat, bahagia, dan hidup lebih lama sampai cucungmu bisa memberi apapun yang kalian mau dan butuhkan.

- ❖ Tanteku tersayang, Elly Yusmita dan Merry Agustina yang ikut andil dalam prosesku. Terimakasih sudah menjadi bagian dari orang yang selalu menjaga, berjuang, dan memberikan semangat, dorongan, nasihat, motivasi serta doa yang selalu kalian panjatkan. Semoga Allah selalu menjaga dan mempermudah setiap langkah kalian serta melimpahkan keberkahan setiap langkah kalian.
- ❖ Keluarga besar Syarifudin dan alm. Adnan yang selalu menemani setiap perjalanan penulis. Terimakasih sudah memberi semangat, doa, ucapan, dorongan, dan motivasi serta menjadi tempat penulis berbagi cerita. Semoga semua selalu diberi kesehatan, kelancaran dan keberkahan dalam setiap langkahnya.
- ❖ Orang terkasih yang tidak bisa disebutkan namanya, terimakasih sudah bersedia menjadi rumah tempat pulang untuk penulis, terimakasih sudah sabar menemani, memberi semangat, dorongan, motivasi, nasihat dan doa serta tenaga yang diberikan dalam menghibur penulis selama menyusun skripsi ini. Semoga Allah SWT selalu memberkahi setiap langkahmu dan menjaga serta selalu mempermudah setiap proses dalam mewujudkan cita-citamu.
- ❖ Sepupuku sekaligus sahabat terbaikku, Dwi Rahma Joan Erlita Putri. Terimakasih atas semua waktu yang kamu luangkan, bersedia menjadi tempat berkeluh kesah dalam segala hal, selalu memberi semangat, dorongan, dan doa yang kamu panjatkan serta menjadi benteng dalam hidupku. Semoga Allah SWT mempermudah dan menjaga setiap langkahmu, tumbuhlah jadi perempuan kuat dan lebih baik dariku.
- ❖ Sepupuku tersayang, M. Adnan Gozali terimakasih atas semua waktu yang kamu luangkan, semangat, dorongan, motivasi, saran dan doa yang selalu kamu ucapkan serta sudah bersedia menghibur sekaligus menjadi tempat berbagi cerita selama proses belajar dan penyusunan skripsi penulis. Semoga Allah SWT mempermudah dan menjaga setiap langkahmu.
- ❖ Sahabat seperjuangan sekaligus saudariku, Izza Parda Muniro walaupun kita tidak sedarah terimakasih sudah bersedia menjadi kakakku yang selalu memberi telinga untuk mendengar dan tangan untuk menggenggam. Semoga

semua kebaikanmu menjadi keberkahan yang melimpah didalam hidupmu dan Allah SWT selalu menjaga setiap langkahmu serta tali silaturahmi ini tetap berjalan sampai till jannah.

- ❖ Sahabat sekaligus saudariku, Ika Adelia dan Nurhasana terimakasih sudah bersedia menjadi diaryku, terimakasih atas semangat, dorongan, serta doa yang kalian panjatkan. Semoga Allah mempermudah, menjaga dan memujudkan semua yang sudah kalian persiapkan serta silaturahmi kita tetap berjalan sampai till jannah.
- ❖ Teman baik sekaligus saudariku, Ravica Safitri terimakasih atas semua kerjasama, kebaikan, kepercayaan, semangat, dorongan yang kau berikan serta doa yang selalu kau panjatkan. Semoga Allah SWT selalu menjaga dan mempermudah setiap langkahmu dalam berproses serta silaturahmi ini selalu tercurahkan.
- ❖ Kakak dan adik-adikku tersayang, Kak Aisyah, Kak Kotel, Yuk Via, Alesha, Rehan, Dea Febiana, Amisa, Bella, Yulizar, Bang Setyo, Firda, Fatur, Tio dan Shintami yang selalu bersedia meluangkan waktu. Terimakasih atas semua semangat, dorongan, motivasi dan nasihat yang diberikan. Semoga Allah selalu menjaga dan mempermudah mewujudkan semua yang kalian inginkan serta silaturahmi ini selalu tercurahkan.
- ❖ Semua pihak yang telah memberikan dukungan dan bantuan baik langsung maupun tidak langsung yang namanya tidak dapat disebutkan satu persatu.

RIWAYAT HIDUP



IDENTITAS DIRI

Nama : Novitria Nurhasanah
NIM : 214820103016
Tempat/Tanggal lahir : Sida kersa, 25 November 2003
Jenis Kelamin : Perempuan
Agama : Islam
Alamat : Dusun I NO. 020, RT. 002, Desa Tanjung Raja
Selatan, Kec. Tanjung Raja, Kab. Ogan Ilir –
Sumsel
No. Telpon : 089626722068

PENDIDIKAN

TAHUN 2009-2015 : SD 07 Tanjung Raja
TAHUN 2015-2018 : SMP Negeri 1 Tanjung Raja
TAHUN 2018-2019 : SMA Negeri 2 Kayuagung
TAHUN 2019-2021 : SMA Negeri 1 Tanjung Raja
TAHUN 2021-Sekarang : Universitas Aisyiyah Palembang

SURAT PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama Mahasiswa : Novitria Nurhasanah

Nomor Iduk Mahasiswa : 214820103016

Program Studi : S1 Farmasi

Judul Skripsi : Membangun Protokol *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) untuk Identifikasi Kandidat Ligan Anti-Hipertensi

Dipublikasikan di : Universitas Aisyiyah Palembang

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.

Palembang, 13 Agustus 2025



HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

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

Nama : Novitria Nurhasanah
Nim : 214820103016
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-Hipertensi” 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.

Di buat di : Universitas Aisyiyah Palembang

Pada Tanggal : 13 Agustus 2025

Yang Menyatakan



Novitria Nurhasanah
214820103016

KATA PENGANTAR

Assalamu'alaikum. Warahmatullahi. Wabarakatuh.

Dengan memanjatkan puji syukur kehadirat Allah SWT atas rahmat dan karunia-Nya, sehingga saya dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Membangun Protokol *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) untuk Identifikasi Kandidat Ligan Anti-Hipertensi”.

Skripsi ini dibuat dalam rangka untuk memenuhi satu syarat akademik untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi (S.Farm). Dalam penyusunan Skripsi ini peneliti banyak mengalami hambatan, namun berkat bimbingan dan bantuan dari berbagai pihak maka Skripsi ini dapat diselesaikan.

Pada kesempatan kali ini, peneliti ingin menyampaikan ucapan terima kasih kepada:

1. Bapak Khoirin, S.KM.,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) Univeritas Aisyiyah Palembang.
3. Ibu apt.Onny Indriani, M.Farm., selaku Ketua Program Studi S1 Farmasi Universitas Aisyiyah Palembang dan Dosen Penguji I yang telah meluangkan waktu sebagai penguji dan memberikan saran.
4. Bapak Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M.Farm. selaku Dosen Pembimbing I yang telah bersedia meluangkan waktu untuk memberikan motivasi,dukungan nasihat serta berbagai saran sehingaa skripsi ini berjalan dengan lancar.

5. Bapak Suprayetno S.Si., M.T. selaku Dosen Pembimbing II yang telah meluangkan waktu untuk memberikan motivasi, dukungan, serta berbagai saran sehingga skripsi ini berjalan dengan lancar.
6. Ibu Ade Oktasari, S.Si, M.Sc. selaku Dosen Penguji I yang telah meluangkan waktu sebagai penguji dan memberikan saran.
7. Untuk teman-teman penelitian kimia komputasiku Thoria, Novitria, Izzaty, Risna dan Vika, terima kasih atas segala kerja sama dan bantuan selama penelitian ini.
8. Bapak dan Ibu dosen staf Universitas Aisyiyah Palembang yang telah banyak memberikan bantuan kepada penulis.
9. Seluruh teman-teman seperjuangan angkatan 2021 yang sudah berjuانبersama-sama dengan penulis selama 4 tahun, suka duka sudah kita lewati bersama, terima kasih sudah memberikan semangat dan dukungan satu sama lain.
10. Semua pihak yang telah memberikan bantuan serta dukungannya kepada penulis.

Sesungguhnya masih banyak lagi pihak yang membantu, namun tidak sempat penulis sebutkan satu persatu disini. Untuk itu, penulis mohon maaf dan menyampaikan terima kasih atas segala bantuan dan kebaikannya.

Akhirnya, Allah Azza Wajalla jualah yang Maha Sempurna untuk membalas segala kebaikan dan bantuan. Semoga limpahan rahman dan rahim Allah tercurah kepada kita semua. Mudah-mudahan Allah ridha sehingga Skripsi ini dapat bermanfaat adanya. Amien.

Palembang, 13 Agustus 2025



Novitria Nurhasanah
214820103016

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

Skripsi, 13 Agustus 2025

Novitria Nurhasanah

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

XXI, 101 Halaman, 5 Tabel, 14 gambar, 7 daftar singkatan, 13 lampiran

ABSTRAK

Latar Belakang: Hipertensi adalah penyakit kronis global yang sering tanpa gejala, menyebabkan komplikasi serius dan kematian. Menurut Organisasi Kesehatan Dunia (WHO) pada tahun 2023, hipertensi adalah masalah kesehatan global yang terus meningkat, dengan lebih dari 1,28 miliar orang (26,4% populasi global) menderita kondisi ini. Proyeksi menunjukkan peningkatan menjadi 29,2% pada tahun 2025. Mengingat efek samping obat jangka panjang, sehingga diperlukan upaya untuk mencari alternatif pengobatan antihipertensi dari sumber alami yang efektif, ekonomis, dan minim efek samping sangat dibutuhkan 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 farmakologi jaringan, penambatan molekul, dan dinamika molekuler. **Kesimpulan:** Berdasarkan penelitian yang dilakukan, dapat disimpulkan bahwa Rosuvastatin membentuk interaksi langsung dengan residu His353 dan Lys511, situs kritis dalam protein reduktase ACE (1o86). 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-179, dengan nilai -13.4910, dikodekan sebagai 1o86179.

Kata kunci: SVBS, Hipertensi, *Molecular Docking*, *Molecular Dynamic*, ACE

Daftar Pustaka: 58 (2020-2025)

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

**Skripsi, 13 August 2025
Novitria Nurhasanah**

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

XXI, 101 Pages, 5 Tables, 14 Figures, 7 Abbreviations, 13 Appendices

ABSTRACT

Background: Hypertension is a global chronic disease that is often asymptomatic, causing serious complications and death. According to the World Health Organisation (WHO) in 2023, hypertension is a growing global health problem, with more than 1.28 billion people (26.4% of the global population) suffering from this condition. Projections indicate an increase to 29.2% by 2025. Given the long-term side effects of medications, there is a need to explore alternative antihypertensive treatments from natural sources that are effective, economical, and minimise side effects. One approach currently under development is the discovery of natural-based drugs using computational studies (in silico), such as network pharmacology, molecular docking, and molecular dynamics. **Objective:** To determine the potential of active drug compounds in identifying the appropriate receptors for hypertension using a network pharmacology approach, and to understand the interactions between active drug compounds and receptor active sites in the SBVS protocol. **Methods:** This study was conducted in silico using network pharmacology, molecular docking, and molecular dynamics. **Conclusion:** Based on the study conducted, it can be concluded that Rosuvastatin forms direct interactions with residues His353 and Lys511, critical sites in the ACE reductase protein (1o86). The system's potential energy also shows stability without significant fluctuations, indicating no major structural changes during the simulation. The calculated free binding energy value is most stable at data point 179, with a value of -13.4910, encoded as 1o86179.

Key words: SBVS, Hypertension, Molecular Docking, Molecular Dynamic, ACE

References: 58 (2020-2025)

DAFTAR ISI

| | |
|---|----------|
| HALAMAN SAMBUNG | i |
| HALAMAN JUDUL | ii |
| LEMBARAN PERSETUJUAN..... | iii |
| LEMBARAN PENGESAHAN | iv |
| LEMBARAN PERSEMBAHAN..... | v |
| RIWAYAT HIDUP..... | ix |
| SURAT PERNYATAAN | x |
| PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI | xi |
| KATA PENGANTAR | xii |
| ABSTRAK..... | xiv |
| DAFTAR ISI | xvi |
| DAFTAR GAMBAR | xviii |
| DAFTAR TABEL | xix |
| DAFTAR SINGKATAN | xx |
| DAFTAR LAMPIRAN..... | xxi |
| BAB I PENDAHULUAN | 1 |
| A. Latar Belakang | 1 |
| B. Rumusan Masalah | 3 |
| C. Tujuan Penelitian | 4 |
| D. Manfaat Penelitian | 4 |
| E. Ruang Lingkup | 5 |
| BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI | 6 |
| A. Tinjauan Pustaka | 6 |
| 1. Hipertensi | 6 |
| 2. Senyawa Penuntun | 8 |
| a. Amlodipin | 8 |

| | |
|---|-----------|
| b. Lisinopril | 9 |
| c. Captopril | 10 |
| d. Furosemid | 11 |
| e. Nifedipin | 12 |
| 3. <i>Studi In Silico</i> | 13 |
| a. <i>Network pharmacology</i> | 14 |
| b. <i>Molecular docking</i> | 15 |
| c. <i>Molecular dynamic</i> | 16 |
| B. Landasan Teori | 13 |
| BAB III METODE PENELITIAN | 19 |
| A. Desain Penelitian | 19 |
| B. Waktu dan Tempat Penelitian | 19 |
| C. Alat dan Bahan | 19 |
| D. Prosedur Penelitian | 20 |
| BAB IV PEMBAHASAN..... | 25 |
| A. Network Pharmacology | 25 |
| B. <i>Molecular Docking</i> | 32 |
| 1. Preparasi dan Pemurnian Reseptor | 32 |
| 2. Preparasi ligan dan running docking..... | 36 |
| C. <i>Molecular Dynamic</i> | 38 |
| 1. Simulasi Dinamika | 38 |
| 2. Identifikasi interaksi ligan di titik aktif reseptor | 42 |
| 3. Perhitungan Nilai <i>Free Binding Energy</i> | 45 |
| 4. Perhitungan Nilai RMSD | 46 |
| BAB V KESIMPULAN DAN SARAN | 49 |
| A. Kesimpulan | 25 |
| B. Saran | 32 |
| DAFTAR PUSTAKA | 50 |
| LAMPIRAN..... | 51 |

DAFTAR TABEL

| | |
|---|----|
| Tabel 4. 1 Nama dan golongan obat anti-hipertensi yang dipilih sebagai senyawa penuntun yang digunakan | 25 |
| Tabel 4. 2 SMILES kelima obat senyawa penuntun anti-hipertensi | 26 |
| Tabel 4. 3 Data bioaktivitas potensial senyawa yang yang terkandung pada obat hipertensi | 27 |
| Tabel 4. 4 Reseptor yang memiliki kecocokan pada obat senyawa penuntun dengan resepyor pada penyakit hipertensi | 30 |
| Tabel 4. 5 Interaksi residu asam amino pada reseptor 1o86 | 32 |

DAFTAR GAMBAR

| | |
|---|----|
| Gambar 2. 1 Struktur kimia amlodipine | 9 |
| Gambar 2. 2 Struktur kimia lisinopril | 10 |
| Gambar 2. 3 Struktur kimia captropil | 11 |
| Gambar 2. 4 Struktur kimia furosemide | 12 |
| Gambar 2. 5 Struktur kimia nifedipin | 13 |
| Gambar 3. 1 Alur Prosedur Penelitian | 24 |
| Gambar 4. 1 Diagram ven | 30 |
| Gambar 4. 2 Reseptor ACE yang belum dimurnikan | 34 |
| Gambar 4. 3 Reseptor ACE yang sudah dimurnikan | 34 |
| Gambar 4. 4 Grid box pada reseptor ACE | 35 |
| Gambar 4. 5 Konversi 3D dari salah satu ligan senyawa penuntun | 37 |
| Gambar 4. 6 Hasil <i>docking</i> | 38 |
| Gambar 4. 7 Proses simulasi dinamika molekul di dalam membran | 39 |
| Gambar 4. 8 Grafik total energi potensial sistem | 40 |
| Gambar 4. 9 Grafik potensial energi komponen | 41 |
| Gambar 4. 10 Grafik residu RMSF | 41 |
| Gambar 4. 11 Ikatan hydrogen yang terbentuk dengan asam amino <i>snapshot</i> 179 pada <i>Discovery studio</i> | 43 |
| Gambar 4. 12 Salah satu asam amino yang terikat pada <i>snapshot</i> 179..... | 45 |
| Gambar 4. 13 Grafik nilai RMSD | 47 |

DAFTAR SINGKATAN

| | |
|------|--|
| SBVS | <i>Structure-Based Virtual Screening</i> |
| WHO | <i>World Health Organization</i> |
| CCB | <i>Calcium Channel Blocker</i> |
| ARB | <i>Angiotensin Receptor Blocker</i> |
| ACE | <i>Angiotensin-Converting Enzyme</i> |
| ACEI | <i>Angiotensin-Converting Enzyme Inhibitor</i> |
| JNC | <i>Join National Committee</i> |

DAFTAR LAMPIRAN

| | |
|---|----|
| Lampiran 1. Pernyataan Selesai Revisi Proposal | 58 |
| Lampiran 2. Surat Permohonan Izin Penelitian..... | 58 |
| Lampiran 3. Hasil data reseptor target pada obat hipertensi | 58 |
| Lampiran 4. Hasil prediksi reseptor pada penyakit anti-hipertensi | 65 |
| Lampiran 5. Perintah docking pada YASARA | 69 |
| Lampiran 6. Perintah md_runmembrane | 70 |
| Lampiran 7. Perintah md_convert-sim2pdb.mcr | 72 |
| Lampiran 8. Perintah md_analyze.mcr | 73 |
| Lampiran 9. PerintahBEcalculation.mcr | 74 |
| Lampiran 10. Mengambil nilai terendah dengan ubuntu | 75 |
| Lampiran 11. Nilai free binding energy selama simulasi dinamika | 76 |
| Lampiran 12. Nilai RMSD bb | 78 |
| Lampiran 13. Nilai RMSD kompleks ligan-reseptor 1o86 | 79 |