

**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 (1086). 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 1086179.

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

Daftar Pustaka: 58 (2020-2025)

**AISYIYAH 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)