

SKRIPSI

**EKSPLORASI LIGAN ANTI-ASMA BERBASIS BAHAN ALAM YANG
DISEBUTKAN DALAM AL-QUR'AN DAN HADITS DENGAN
METODE *STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING*
(SBVS) PADA TARGET RESEPTOR
BETA-2 ADRENERGIK**



OLEH :
RAVICA SYAFITRI
214820103021

PROGRAM STUDI SI FARMASI
FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS AISYIAH PALEMBANG

2025

SKRIPSI

**EKSPLORASI LIGAN ANTI-ASMA BERBASIS BAHAN ALAM YANG
DISEBUTKAN DALAM AL-QUR'AN DAN HADITS DENGAN
METODE *STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING*
(SBVS) PADA TARGET RESEPTOR
BETA-2 ADRENERGIK**

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



OLEH :

RAVICA SYAFITRI

214820103021

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

LEMBAR PERSETUJUAN
SKRIPSI
EKSPLORASI LIGAN ANTI-ASMA BERBASIS BAHAN ALAM YANG
DISEBUTKAN DALAM AL-QUR'AN DAN HADITS DENGAN
METODE *STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING*
(SBVS) PADA TARGET RESEPTOR
BETA-2 ADRENERGIK

Oleh :
Ravica Syafitri
214820103021

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


(.....)

II. Deden Mula Saputra, S.Th.I., M.Ud.
NIDN. 2119128805


(.....)

Mengetahui,
Ketua Program Studi S1 Farmasi


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

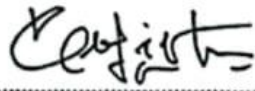
LEMBAR PENGESAHAN
SKRIPSI
EKSPLORASI LIGAN ANTI-ASMA BERBASIS BAHAN ALAM YANG
DISEBUTKAN DALAM AL-QUR'AN DAN HADITS DENGAN
METODE *STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING*
(SBVS) PADA TARGET RESEPTOR
BETA-2 ADRENERGIK

Oleh :
Ravica Svafitri
214820103021


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. Deden Mula Saputra, S.Th.I., M.Ud.
NIDN. 2119128805

()

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


()

IV. Supravetno, S.Si., M.T.
NIK. 2015.10.075

()

Disahkan Oleh,
Dekan Fakultas Kesehatan dan Teknologi



()
Ns. Miming Oxvandi, S.Kep, M.Kes, M.Kep, Ph.D
NIK. 2010.03.022

MOTTO DAN PERSEMBAHAN

Motto :

“Allah tidak membebani hambanya melebihi batas kemampuannya”

“Apa yang dimulai harus diakhiri, karena setiap langkah yang diambil bukan hanya tentang memulai, tetapi juga tentang menyelesaikan dengan penuh keteguhan dan kesungguhan”.

Persembahan :

Skripsi ini saya persembahkan kepada :

- ❖ Kedua orang tuaku, terima kasih atas kasih sayang yang tiada batas, doa yang selalu mengiringi langkah, serta pengorbanan dan perjuangan yang tidak pernah lelah demi masa depan saya. Tanpa bimbingan, dukungan dan semangat yang kalian tanamkan, saya tidak akan mampu menyelesaikan perjalanan akademik ini dengan baik. Kalian adalah sumber kekuatan dan inspirasi dalam hidup saya.
- ❖ Kepada kedua kakak saya, terima kasih atas perhatian, motivasi, serta nasihat yang selalu menguatkan saya di saat menghadapi tantangan. Setiap dorongan dan kata-kata bijak dari kedua kakak saya sangat berarti dan menjadi penyemangat untuk terus maju.
- ❖ Kepada dosen pembimbing saya, bapak Dr. Gerry Nugraha, M.Sc. M.Farm dan bapak Deden Mula Saputra, S.Th.i., M.ud. saya sampaikan terima kasih yang sebesar-besarnya atas kesabaran, bimbingan dan ilmu yang diberikan selama proses penelitian dan penulisan skripsi ini.
- ❖ Terima kasih untuk diri saya sendiri, Ravica Syafitri karena sudah bertahan dan kuat sampai dengan di titik sekarang, semangat dan terus berjuang untuk hari ini esok nanti dan selamanya.

RIWAYAT HIDUP



IDENTITAS DIRI

Nama : Ravica Syafitri
Tempat/Tanggal lahir : Palembang, 10 Juni 2004
Jenis kelamin : Perempuan
Alamat : Jl. Tegal binangun Jr. Karang anyar Kec. Plaju
Kel. Plaju darat
Agama : Islam

RIWAYAT PENDIDIKAN

Tahun 2009-2010 : Tk Al-Afiq
Tahun 2010-2016 : SD Negeri 260 Palembang
Tahun 2016-2019 : SMP Negeri 24 Palembang
Tahun 2019-2021 : SMK Kesehatan Athalla Putra Palembang
Tahun 2021-Sekarang : Universitas Aisyiyah Palembang

SURAT PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Ravica Syafitri
Tempat/Tanggal Lahir : Palembang, 10 Juni 2004
Jenis Kelamin : Perempuan
Alamat : Jln Tegal Binangun Lr. Karang Anyar Rt 23 Rw
07 Kecamatan Plaju Kelurahan Plaju Darat
Telepon/HP : 083829819705
Judul Penelitian : Eksplorasi Ligan Anti-Asma Berbasis Bahan
Alam Yang Disebutkan Dalam Al-Qur'an Dan
Hadits Dengan Metode *Structure-Based Virtual
Screening* (SBVS) Pada Target Reseptor Beta-2
Adrenergik
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 di atas, maka saya bersedia dituntut secara hukum.

Palembang, 14 Agustus 2025
Yang Menyatakan



Ravica Syafitri
214820103021

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

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

Nama : Ravica Syafitri
Nim : 214820103021
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 "Eksplorasi Ligan Anti-Asma Berbasis Bahan Alam Yang Disebutkan Dalam Al-Quran Dan Hadits Dengan Metode *Structure-Based Virtual Screening* (Sbvs) Pada Target Reseptor Beta-2 adrenergik" 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



Ravica Syafitri
214820103021

KATA PENGANTAR

Bismillahirrahmanirrahim

Assalamu'alaikum Warrahmatullahi Wabarakatuh

Alhamdulillahilalamin Puji Dan Syukur Saya Ucapkan Kehadirat Allah SWT karena atas Berkat Rahmat Dan Karunia-Nyalah sehingga saya dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Eksplorasi Ligan Anti-Asma Berbasis Bahan Alam Yang Disebutkan Dalam Al-Quran Dan Hadits Dengan Metode *Structure-Based Virtual Screening* (Sbvs) Pada Target Reseptor Beta-2 Adrenergik”.

Saya menyadari dalam penyusunan proposal skripsi ini tidak akan selesai tanpa bantuan berbagai pihak, oleh karena itu pada kesempatan ini saya ingin mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada :

1. Bapak Khoirin, Skm., M.Kes., selaku Ketua 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.
4. Bapak Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M. Farm, selaku dosen pembimbing I sekaligus dosen penguji yang telah banyak memberikan waktu, arahan dan masukan terkait perbaikan dalam penulisan skripsi ini.
5. Bapak Deden Mula Saputra, S.Th.i.M.ud, selaku dosen dosen Pembimbing II sekaligus desen penguji yang telah banyak memberikan waktu, arahan dan masukan terkait perbaikan dalam penulisan skripsi ini.

6. Bapak Dr. Amrullah, M.Pd.I, selaku dosen penguji I yang telah meluangkan waktunya untuk menguji dan telah memberikan banyak saran.
7. Bapak Suprayetno, S.Si., M.T, selaku dosen penguji II yang telah meluangkan waktunya untuk menguji dan telah memberikan banyak saran.
8. Bapak dan Ibu dosen beserta staff Universitas Aisyiyah Palembang yang telah memberikan bimbingan dan bantuan kepada penulis dalam menyelesaikan skripsi ini.
9. Bapak dan Ibu saudaraku tercinta yang telah memberikan dorongan baik moral maupun material dan juga telah berjuang keras untuk keberhasilanku.
10. Semua pihak yang telah memberikan dukungan dan bantuan kepada penulis

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih banyak memiliki kekurangan. Oleh karena itu penulis mengharapkan kritik dan saran demi kesempurnaan dan perbaikannya sehingga skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi banyak orang.

Palembang, Agustus 2025



Ravica Syafitri
214820103021

UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG
FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
PROGRAM STUDI S1 FARMASI

Skripsi, 14 Agustus 2025

Ravica Syafitri

EKSPLORASI LIGAN ANTIASMA BERBASIS BAHAN ALAM YANG
DISEBUTKAN DALAM AL-QUR'AN DAN HADITS DENGAN METODE
STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING (SBVS) PADA TARGET
RESEPTOR BETA-2 ADRENERGIK

Xxi, 93 Halaman, 6 Tabel, 12 Gambar, 9 Singkatan, 10 Lampiran

ABSTRAK

Latar Belakang : Asma merupakan masalah kesehatan global dengan prevalensi yang terus meningkat setiap tahunnya, termasuk di Indonesia. Pengobatan konvensional sering menimbulkan efek samping signifikan jika dikonsumsi dalam waktu yang panjang, sehingga diperlukan alternatif berbasis bahan alam yang lebih aman dan terjangkau. Bahan alam yang terdapat dalam al-Quran dan hadits dijadikan sebagai terapi untuk penyakit asma. **Tujuan :** Melakukan validasi protokol SBVS (*Structure-Based Virtual Screening*) dengan simulasi *re-docking* 1000x, Melakukan SBVS (*Structure-Based Virtual Screening*) senyawa-senyawa dalam bahan alam yang disebutkan al-Quran dan hadits. **Metode :** *Insilico* dengan metode *re-docking* dan *structure-based virtual screening*. **Hasil :** Hasil analisis *re-docking* menunjukkan bahwa protokol reseptor beta-2 adrenergik (PDB: 2Rh1) telah tervalidasi dengan baik dan dapat dipercaya untuk digunakan dalam skrining virtual ligan berikutnya. Hal ini dibuktikan dengan nilai RMSD yang kurang dari 2Å sebesar 99,7%, dengan tingkat kepercayaan mencapai 99%. Hasil analisis SBVS, ditemukan empat bahan alam berpotensi sebagai terapi penyakit asma, yaitu jahe, saffarjal, delima, dan anggur, yang membentuk ikatan dengan asam amino Asp113 pada reseptor beta-2 adrenergik (PDB: 2Rh1). **Kesimpulan :** Bahan alam seperti jahe, saffarjal, delima, dan anggur berpotensi untuk penyakit asma karena terbentuk ikatan dengan asam amino Asp113 terhadap reseptor beta-2 adrenergik (kode pdb : 2Rh1).

Kata kunci : al-Quran dan Hadits, Asma, Bahan alam, *Re-docking*, SBVS.

Daftar pustaka : 69 (2007-2025)

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

Skripsi, 14 August 2025

Ravica Syafitri

**EXPLORATION OF NATURAL-BASED ANTI-ASTHMA LIGANDS
MENTIONED IN THE QUR'AN AND HADITH USING THE
STRUCTURE-BASED VIRTUAL SCREENING (SBVS) METHOD ON
THE BETA-2 ADRENERGIC RECEPTOR TARGET**

Xxi, 93 Pages, 6 Tables , 12 Pictures , 9 Abbreviations , 10 Appendices

ABSTRACT

Background: Asthma is a global health problem with a prevalence that continues to increase every year, including in Indonesia. Conventional treatments often cause significant side effects when taken over a long period of time, so safer and more affordable alternatives based on natural ingredients are needed. Natural ingredients found in the Quran and hadiths are used as therapy for asthma. **Objective:** To validate the SBVS (Structure-Based Virtual Screening) protocol with 1000x re-docking simulation, to perform SBVS (Structure-Based Virtual Screening) of compounds in natural ingredients mentioned in the Quran and Hadith. **Methods:** Insilico with re-docking and structure-based virtual screening methods. **Results:** The re-docking analysis results showed that the beta-2 adrenergic receptor protocol (PDB: 2Rh1) has been well validated and can be trusted for use in subsequent virtual ligand screening. This is evidenced by an RMSD value of less than 2Å of 99.7%, with a confidence level of 99%. SBVS analysis results found four natural ingredients with potential as asthma treatments, namely ginger, saffron, pomegranate, and grape, which form bonds with the amino acid Asp113 on the beta-2 adrenergic receptor (PDB: 2Rh1). **Conclusion:** Natural substances such as ginger, saffron, pomegranate, and grape have potential for asthma treatment because they form bonds with the amino acid Asp113 on the beta-2 adrenergic receptor (PDB code: 2Rh1).

Keywords : Asthma, Natural Material, Re-docking, SBVS, Quran and Hadith.

Bibliography: 69 (2007- 2025).

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	I
HALAMAN JUDUL	II
LEMBAR PERSETUJUAN.....	III
LEMBAR PEGESAHAN	IV
MOTTO DAN PERSEMBAHAN.....	V
RIWAYAT HIDUP	VI
SURAT PERNYATAAN.....	VII
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI.....	VIII
KATA PENGANTAR	IX
ABSTRAK	XI
ABSTRACT	XII
DAFTAR ISI	XIII
DAFTAR TABEL	XV
DAFTAR GAMBAR.....	XVI
DAFTAR LAMPIRAN.....	XVII
DAFTAR ISTILAH DAN SINGKATAN	XVIII
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	4
C. Tujuan Penelitian	4
D. Manfaat penelitian.....	5
E. Ruang lingkup Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI	6
A. Tinjauan pustaka	6
1. Asma	6
2. Jenis-jenis bahan alam yang terdapat dalam al-Quran dan hadits	

serta relevansinya.....	7
a. Bahan alam dalam al-Quran.....	7
b. Bahan alam dalam hadits	8
c. Mekanisme bahan alam yang terdapat dalam al-Qur'an dan hadits	8
3. Kimia komputasi.....	17
a. <i>Re-docking</i>	18
b. SBVS (<i>Structure-Based Virtual Screening</i>)	18
4. Aplikasi Database penunjang	19
a. Ubuntu	19
b. <i>Discovery studio visualizer</i>	20
c. <i>Yasara-structure</i>	21
B. Landasan Teori.....	21
C. Pedoman Etika Dan Prosedur Penelitian Kajian Al-Qur'an Dan Hadits Dalam Penelitian Farmasi.....	24
BAB III METODE PENELITIAN	29
A. Desain Penelitian.....	29
B. Waktu dan Tempat penelitian	29
C. Alat dan bahan penelitian	29
D. Prosedur penelitian	31
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	37
A. Validasi protokol	37
1. Menghilangkan membran pada reseptor beta-2 adrenergik dan melakukan optimasi energi.....	37
2. Pembuatan grid box	39
3. <i>Re-docking</i>	41
B. SBVS (<i>Structure-Based Virtual screening</i>).....	42
1. Mengumpulkan referensi bahan alam dari al-Quran dan Hadits serta melakukan skrining pada struktur bahan alam	42
2. Konversi SMILES menjadi struktur 3D.....	49
3. Energy bebas ikatan (<i>Free binding energy</i>) dan analisis ikatan Hydrogen	50
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	65
A. Kesimpulan.....	65
B. Saran.....	65
DAFTAR PUSTAKA	66
LAMPIRAN.....	76

DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1	Ligan yang digunakan dan jumlah kandungan senyawa bahan alam dalam al-Qur'an dan hadits.....	30
Tabel 4. 1	Identifikasi bahan alam dan jumlah struktur bahan alam dalam al-Quran	44
Tabel 4. 2	Identifikasi bahan alam dan jumlah struktur bahan alam dalam Hadits	45
Tabel 4. 3	Hasil screening bahan alam terdapat dalam al-Qur'an dan hadits	48
Tabel 4. 4	Hasil analisis <i>free binding energy</i>	50
Tabel 4. 5	Hasil analisis ikatan hydrogen	52

DAFTAR GAMBAR

Gambar 3. 1	Alur Prosedur Penelitian.....	35
Gambar 4. 1	(a) reseptor sebelum membran dihilangkan dan (b) reseptor setelah membran dihilangkan.....	37
Gambar 4. 2	<i>Gridbox</i> dan reseptor beta-2 adrenergik (2RH1) yang dibuat kaku (<i>rigid</i>)	39
Gambar 4. 3	Struktur 3D pada jahe dengan kode LTS0015434	49
Gambar 4. 4	Visualisasi 2D dengan kode LTS0015434 pada jahe	54
Gambar 4. 5	Jahe (<i>Zigiber Officinale</i>).....	54
Gambar 4. 6	Visualiasi 2D dengan kode LTS0154951 pada saffarjal	56
Gambar 4. 7	Saffarjal (<i>Cydonia oblonga</i>).....	57
Gambar 4. 8	Visualiasi 2D dengan kode LTS0167991 pada delima.....	59
Gambar 4. 9	Delima (<i>Punica Granatum</i>)	59
Gambar 4. 10	Visualiasi 2D dengan kode LTS0123772 pada anggur	62
Gambar 4. 11	Anggur (<i>vitis vinifera</i>)	62

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Pernyataan Selesai Revisi Proposal	76
Lampiran 2. Surat Permohonan Izin Penelitian.....	77
Lampiran 3. RMSD (<i>Root Mean Square Deviatoin</i>).....	78
Lampiran 4. Hasil Screening Ligand	79
Lampiran 5. <i>dock_run_1000.mcr</i>	82
Lampiran 6. <i>smi2pdb.mcr</i>	83
Lampiran 7. Perangkat Lunak YASARA- <i>Structure</i>	84
Lampiran 8. Perangkat Lunak <i>Discovery Studio Visualizer</i>	85
Lampiran 9. <i>Lotus Natural Product</i>	86
Lampiran 10. Formulir Bimbingan Skripsi.....	87
Lampiran 11. Pernyataan Selesai Revisi Skripsi.....	88

DAFTAR ISTILAH DAN SINGKATAN

WHO	: <i>World Health Organization</i>
RIKESDAS	: <i>Riset Kesehatan Dasar</i>
SBVS	: <i>Structure-Based Virtual Screening</i>
RMSD	: <i>Root Mean Square Deviation</i>
SDF	: <i>Structure Data Format</i>
LTS	: <i>Lotus</i>
SMILES	: <i>Simplified Molecular Input Line Entry System</i>
ASC II	: <i>American Standard Code for Information Interchange</i>
CAMP	: <i>Cyclic Adenosine Monophosphate</i>