

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, 106 Halaman, 6 Tabel, 12 Gambar, 9 Singkatan, 11 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, 106 Pages, 6 Tables , 12 Pictures , 9 Abbreviations , 11 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).