LAMPIRAN

Lampiran 1. Pernyataan Selesai Revisi Skripsi

FAKULTAS ILMU KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
'AISYIYAH PALEMBANG
PROGRAM STUDI S1 FARMASI
Jl. Kol. H. Burlian –Lr. M. Husin No. 907 RT. 12/RW. 04 Kel. Karya Baru
Kec. Alang-alang LebarKM. 7,5 Palembang 30152 Telp. 0711-421981
www.unisa-palembang.ac.id farmasi.aisyiyah@gmail.com

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَٰنِ الرَّحِيمِ

FORMULIR
PERNYATAAN SELESAI REVISI PROPOSAL/ ~~NASKAH SKRIPSI~~*)
(S-06)

Yang bertandatangan dibawah ini, tim penguji Skripsi 1/ ~~Skripsi 2~~*):

Nama Mahasiswa : Ravica Syafitri

NIM : 214820103021

Judul Penelitian : Eksplorasi Ligan Antiasma Berbasis Tumbuhan Dalam al-Qur'an dan adits Dengan Metode *Structure-based Virtual Screening* (SBVS)

Pembimbing 1 : Dr. Gerry Nugraha,M.Sc., M.Farm

Pembimbing 2 : Deden Mula Saputra, S.Th.I., M.Ud

Tanggal Ujian : 11 Januari 2025

Menerangkan bahwa naskah Proposal/ ~~Skripsi~~*) telah **selesai** direvisi oleh tim penguji.

Nama	Tanda Tangan	Tanggal
1. Dr. Gerry Nugraha,M.Sc., M.Farm		3/2025 03
2. Deden Mula Saputra, S.Th.I., M.Ud		3/2025 03
3. Dr. Amrullah, M.Pd.I		3/2025 03
4. Suprayetno, S.Si.,MT.		3/2025 03

*) : Coret yang tidak perlu.

Lampiran 2. Surat Permohonan Izin Penelitian

	SURAT	No Dokumen	Form-A1
		Berlaku Sejak	
	PERMOHONAN IZIN PENELITIAN PROGRAM STUDI S-1 FARMASI UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG	Revisi	000

1	Skripsi
2	PKM/LKTI
3	Penelitian Dosen
4	Luar

Hal : Permohonan Izin Penelitian

Kepada Yth
Kabag Laboratorium Terpadu
Universitas 'Aisyiyah Palembang

Assalamualaikum Wr. Wb.
Sehubungan dengan penelitian kami dalam bidang Kimia Komputasi dengan:
Judul Penelitian : Eksplorasi ligan Anti-Asma berbasis tumbuhan dalam Al-Qur'an dan hadits dengan metode SBVS

Nama Pembimbing : 1. Gerry nugraha, M.Sc., M.Farm
2. Deden mira saputra, S.Thi., M.Ud.

No	Nama	NIM/NIP/NIK	No. HP
1	Ravica syafitri	2148201030 21	0838298 19705
2			
3			
4			
5			

Bermaksud mengajukan izin penelitian di Laboratorium*): **Farmasetika Dasar / Teknologi Farmasi / Kimia Farmasi / Biologi Farmasi / Farmakologi / Mikrobiologi / (Komputasi)**
Prodi S1 Farmasi Universitas 'Aisyiyah Palembang.
Penelitian tersebut akan kami laksanakan selama: ....6.... bulan,
yang terhitung dari : 19 | 03 | 2025 s.d 19 | 08 | 2025

Sebagai bahan pertimbangan, bersama ini dilampirkan lembar pengesahan proposal penelitian.
Demikian permohonan kami, atas perhatiannya diucapkan terima kasih.

Palembang, 19 maret 2025

Mengetahui,
Dosen Pembimbing

Gerry Nugraha M.Sc., M.Farm

Pemohon

Ravica Syafitri

Menyetujui,
Kabag Laboratorium Terpadu

Neni Riyanti, SKM., M.Kes

Kaprodi S1 Farmasi

Apt. Anny Indriani M.Farm

Lampiran 3. RMSD (*Root Mean Square Deviation)*

5.6158	0.8859	0.7276
4.674	0.8833	0.7271
3.2782	0.8824	0.726
1.9159	0.8812	0.7255
1.8932	0.8803	0.7248
1.8363	0.8801	0.7243
1.8252	0.8794	0.7239
1.5036	0.8729	0.7237
1.3464	0.8708	0.7233
0.9651	0.8707	0.723
0.9407	0.8706	0.7225
0.9369	0.8704	0.7224
0.9368	0.8699	0.7221
0.9346	0.8697	0.7221
0.9275	0.8666	0.7221
0.9265	0.8642	0.7217
0.926	0.8634	0.7216
0.9236	0.8611	0.7211
0.9219	0.8597	0.721
0.9209	0.8595	0.7209
0.9206	0.8595	0.7203
0.9149	0.8589	0.7194
0.913	0.8584	0.7192
0.9123	0.8581	0.7187
0.9091	0.858	0.7186
0.9073	0.8566	0.7179
0.9046	0.8562	0.7175
0.9012	0.8553	0.7174
0.8986	0.8551	0.7173
0.8966	0.8534	0.7167
0.8944	0.8531	0.7165
0.8915	0.8515	0.7163
0.8489	0.8508	0.7159
0.8421	0.8053	0.7158
0.8416	0.805	0.7154
0.8404	0.8038	0.7147
0.8397	0.7976	0.7147
0.8375	0.7973	0.7145
0.8352	0.787	0.714
0.8341	0.7846	0.7138

Lampiran 4. Hasil Screening Ligand

0094| 000000.4341 | 000012.5900 | 00000000000590.7553 | 000434.15 | LTS0015434 | A THR 110 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A THR 164 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 208 A TRP 286 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A ILE 294 A TYR 308 A ASN 312 A TYR 316 | COc1cc(CC[C@H]2C[C@H](O)C[C@H](c3cc(OC)c(O)c(OC)c3)O2)ccc1O

0221| 000000.3665 | 000012.4600 | 00000000000735.6968 | 000564.42 | LTS0037470 | A VAL 86 A THR 110 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A ILE 169 A TYR 174 A ASP 192 A PHE 193 A PHE 194 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 208 A TRP 286 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A LYS 305 A TYR 308 A ILE 309 A ASN 312 A TRP313ATYR316|COc1ccc(/C=C/COC(=O)CCCCCCC/C=CC/C=CCCCCCO)cc1C

1027| 000000.3533 | 000011.6600 | 00000000002838.6162 | 000424.53 | LTS0167991 | A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A THR 164 A SER 165 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A ILE 205 A SER 207 A PHE 208 A TYR 209 A TRP 286 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A ILE 294 A TYR 316|COc1cc(/C=C/CO[C@@H]2O[C@H](CO[C@@H]3OC[C@](O)(CO)[C@H]3O)[@@H](O)[C@H](O)[C@H]2O)ccc1O

0776| 000000.3591 | 000011.4900 | 00000000003781.9722 | 000411.30 | LTS0123772 | A THR 110 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A THR 118 A THR 164 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 208 A TRP 286 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A TYR 308 A ASN 312 A TYR 316 | CC(=CCC/C(=CCO[C@@H]1O[C@H](CO[C@@H]2O[C@@H](C)[C@H](O)[C@@H](O)[C@H]2O)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]1O)/C)C

0348| 000000.3783 | 000011.3500 | 00000000004790.0459 | 000423.05 | LTS0055885 | A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 208 A TRP 286 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A TYR308AASN312ATYR316|COc1cc(CC[C@@H](O)C[C@@H](CCc2ccc(O)c(OC)c2)OC(=O)C)ccc1O

1353| 000000.3271 | 000011.1200 | 00000000007062.0684 | 000569.41 | LTS0215004 | A VAL 86 A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A ILE 169 A TYR 174 A ALA 176 A HIS 178 A ASP 192 A PHE 193 A PHE

194 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 208 A TRP 286 A PHE 289 A ASN 293 A ASP 300 A ASN 301 A LYS 305 A TYR 308 A ILE 309 A ASN 312 A TYR 316 | COc1ccc(/C=C/COC(=O)CCCCCCC/C=C/C/C=C/CCCCCO)cc1OC

1628| 000000.3163 | 000011.0700 | 00000000007683.9126 | 000505.63 | LTS0261653 | A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A ILE 169 A TYR 174 A ALA 176 A HIS 178 A PHE 193 A PHE 194 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 289 A ASN 293 A ASP 300 A LYS 305 A TYR 308 A ILE 309 A ASN 312 A TYR 316 | COc1cc(c2cc(=O)c3c(O)cc(O[C@@H]4O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]4O)cc3o2)cc(OC)c1O

0078| 000000.3235 | 000011.0000 | 00000000008647.5498 | 000560.79 | LTS0012985 | A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A ILE 205 A SER 207 A PHE 208 A TYR 209 A TRP 286 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A ILE 294 A TYR 308 A ASN 312 A TYR 316 | CCCCCCCCCCCCCCC(=O)CC(=O)CCCCCCCCC[C@@H](O)CCCCC

0911| 000000.3558 | 000011.0300 | 00000000008220.5859 | 000484.64 | LTS0145614 | A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A THR 164 A ILE 169 A TYR 174 A HIS 178 A PHE 193 A PHE 194 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 208 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A ASP 300 A TYR 308 A ILE 309 A ASN 312ATYR316|COc1cc([C@H]2OC[C@@H]3[C@@H](c4ccc(OC)c(OC)c4)OC[C@]23OC(=O)C)ccc1O

0634| 000000.3793 | 000011.0000 | 00000000008647.5498 | 000414.40 | LTS0099776 | A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 208 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A TYR 308 AASN312ATYR316|C=C(C)[C@H]1Cc2cc3ccc(=O)oc3c(O[C@@H]3O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H](O)[C@H]3O)c2O1

0811| 000000.3226 | 000010.9700 | 00000000009096.6895 | 000549.61 | LTS0129384 | A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A

ILE 201 A SER 203 A SER 204 A ILE 205 A SER 207 A PHE 208 A TYR 209 A TRP 286 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A ILE 294 A TYR 308 A ASN 312 A TYR 316 | CCCCCCCCCCCCCC(=O)CC(=O)CCCCCCCC[C@@H](O)CCCCCC

0616| 000000.3653 | 000010.9600 | 00000000009251.5283 | 000468.79 | LTS0096165 | A THR 110 A ASP 113 A VAL 114 A THR 164 A SER 165 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A ILE 205 A SER 207 A TYR 209 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A ILE 294 A TYR 308 A ASN 312 A TYR 316 COc1cc(CCC(=O)C[C@H](CCc2ccc(O)c(OC)c2)OC(=O)C)ccc1O

0911| 000000.3532 | 000010.9500 | 00000000009409.0020 | 000484.64 | LTS0145614 | A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A THR 164 A ILE 169 A TYR 174 A HIS 178 A PHE 193 A PHE 194 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 208 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A ASP 300 A TYR 308 A ILE 309 A ASN 312ATYR316|COc1cc([C@H]2OC[C@@H]3[C@@H](c4ccc(OC)c(OC)c4)OC[C@]23OC(=O)C)ccc1O

1223| 000000.3650 | 000010.9500 | 00000000009409.0020 | 000399.69 | LTS0197417 | A VAL 86 A THR 110 A SER 111 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A THR 118 A SER 165 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A SER 207 A PHE 208 A TRP 286 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A TYR 308 A ASN 312 A TYR 316CC[C@@H](CC[C@H](C)[C@@H]1CC[C@@H]2C3=CC[C@@H]4C[C@@H](O)CC[C@]4(C)[C@H]3CC[C@]12C)C(C)C

1618| 000000.3650 | 000010.9500 | 00000000009409.0020 | 000494.21 | LTS0260139 | A THR 110 A ASP 113 A VAL 114 A VAL 117 A THR 164 A ILE 169 A TYR 174 A PHE 193 A THR 195 A GLN 197 A TYR 199 A ALA 200 A ILE 201 A SER 203 A SER 204 A ILE 205 A SER 207 A PHE 208 A TYR 209 A TRP 286 A PHE 289 A PHE 290 A ASN 293 A ILE 294 A ASN 312 A TYR 316 | CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)OC/C=C/c1ccc(O)c(OC)c1

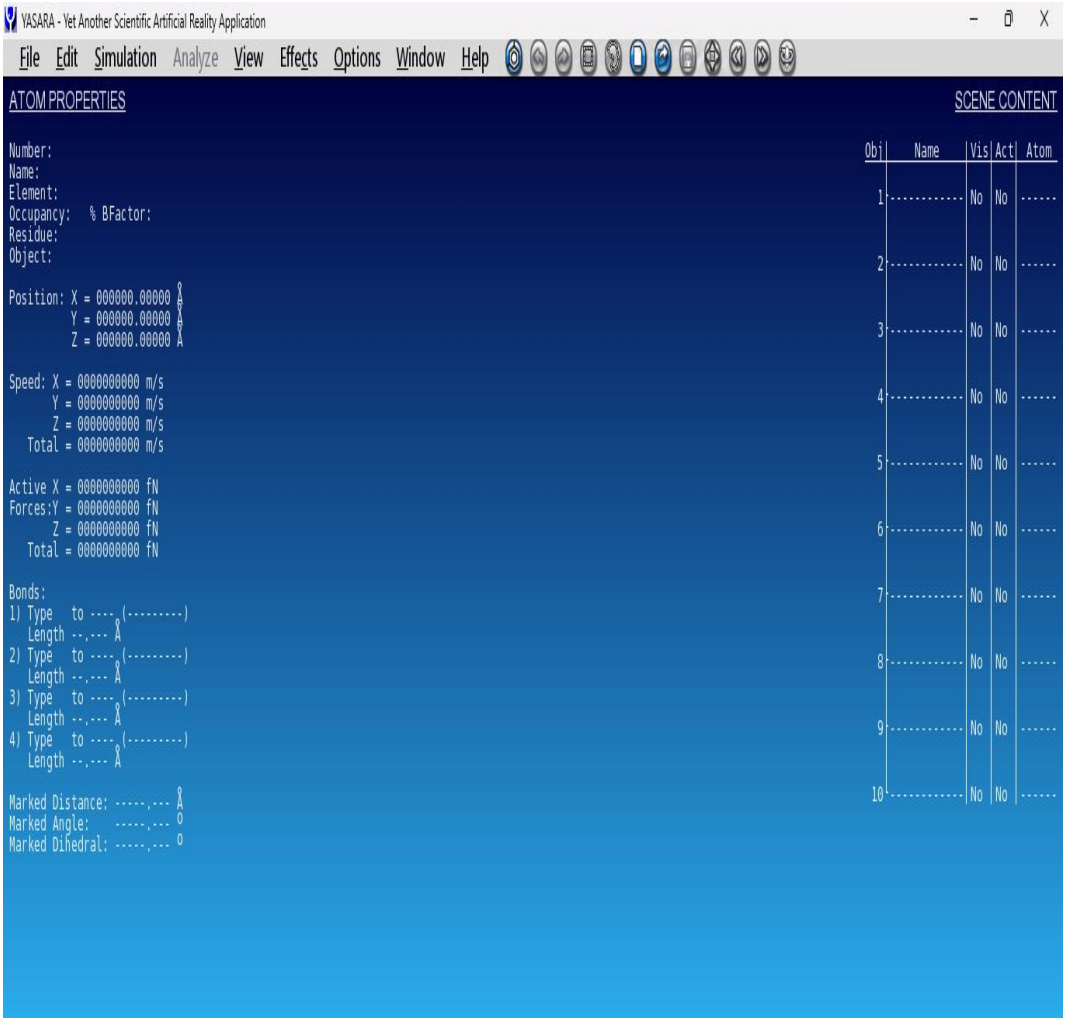
Lampiran 5. doc*k_run_1000.mcr*

```
# YASARA MACRO
# TOPIC: 5. Structure prediction
# TITLE: Docking a ligand to a receptor
# REQUIRES: Structure
# AUTHOR: Elmar Krieger
# LICENSE: GPL
# DESCRIPTION: This macro predicts the structure of a ligand-receptor complex. It can also continue a docking run that got interrupted. An analysis log file is written at the end.
#
# Parameter section - adjust as needed, but NOTE that some changes only take effect
# if you start an entirely new docking job, not if you continue an existing one.
#
=============================================================================
# Energy minimization experiment completed after 765 steps. Final energy is -20568.574 kJ/mol.
# MODIFIED YASARA MACRO by Roy Gunawan Wicaksono (11 Oct 2019)
# DESCRIPTION: This macro re-dock 1000 times ligand to its receptor to examine the aplicability of the receptor for virtual screening
Processors CPUThreads=50,GPU=1
Antialias 0
Console Off
method='AutoDockLGA'
#method='VINA'
runs=5
rmsdmin=5.0
rigid=0
flexres=''
calcspread=1
pdbsaved=0
ForceField AMBER03
# Normally no change required below this point
# ============================================
# Sanity checks
if MacroTarget==''
#MacroTarget
/home/al/yasara/00_lotus2024/03_redock/4yay_receptor.sce,Remove=FromUnderscore
 RaiseError "This macro requires a target. Either edit the macro file or click Options > Macro > Set target to choose a target structure"
```

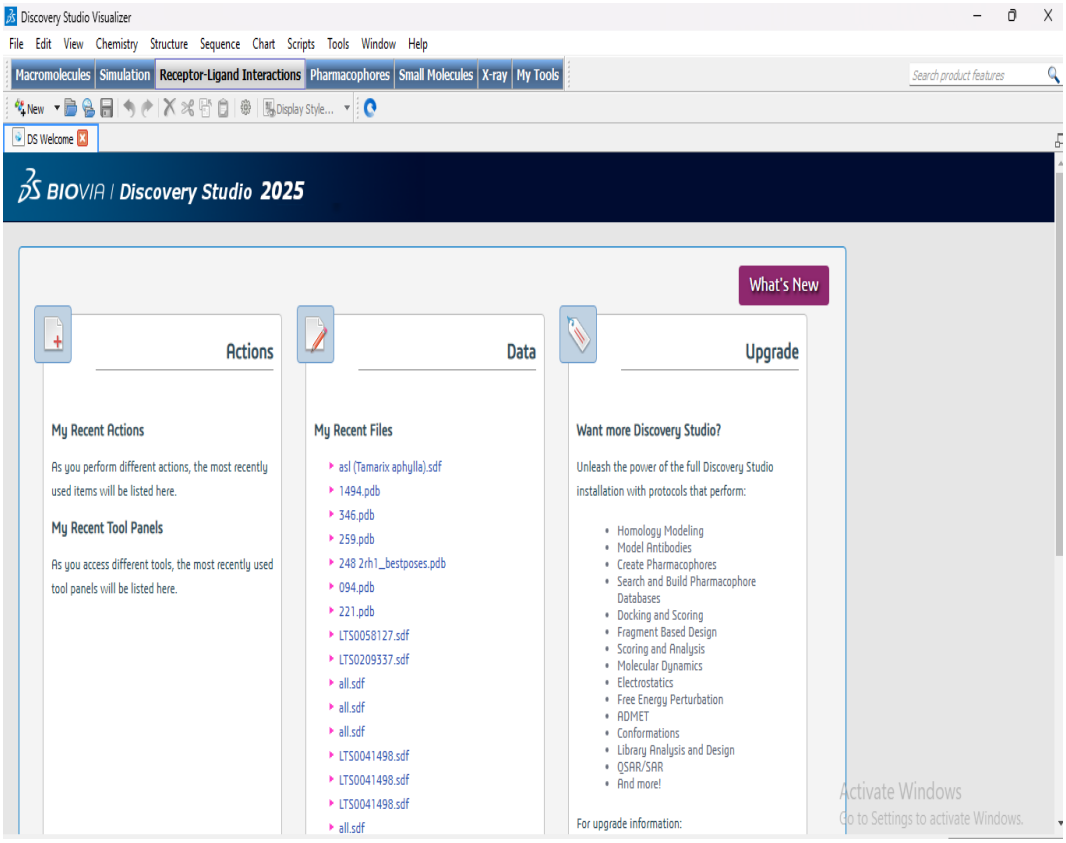
Lampiran 6**.** *smi2pdb.mcr.*

```
Processors CPUThreads=1,GPU=0
Antialias 0
Console Off
#nice-n20~/yasara/yasara-
txt"/home/al/yasara/1_natpro/zinc_bio_N/008/smi2pdb.mcr"
#MacroTarget (name).smi,Remove=Extension
CD (MacroDir)
libname='(MacroTarget)'
OnError Continue
Clear
for line in file (libname).smi
 # Extract SMILES and name
 smiles,name=split line
 # Build SMILES
 obj = BuildSMILES '(smiles)'
 # Minimize with NOVA to close any long bonds that BuildSMILES left
 # (QM optimization doesn't know where bonds should be)
 pH value=7.4,update=Yes
 Cell Auto,Extension=10
 ForceField NOVA,SetPar=yes
 Experiment Minimization
 Experiment On
 Wait ExpEnd
 # Set compound name
 CompoundMol Obj (obj),'(name)'
 SaveSDF !SimCell,(name).sdf
 SavePDB !SimCell,(name).pdb
 DelObj (obj)
Clear
```

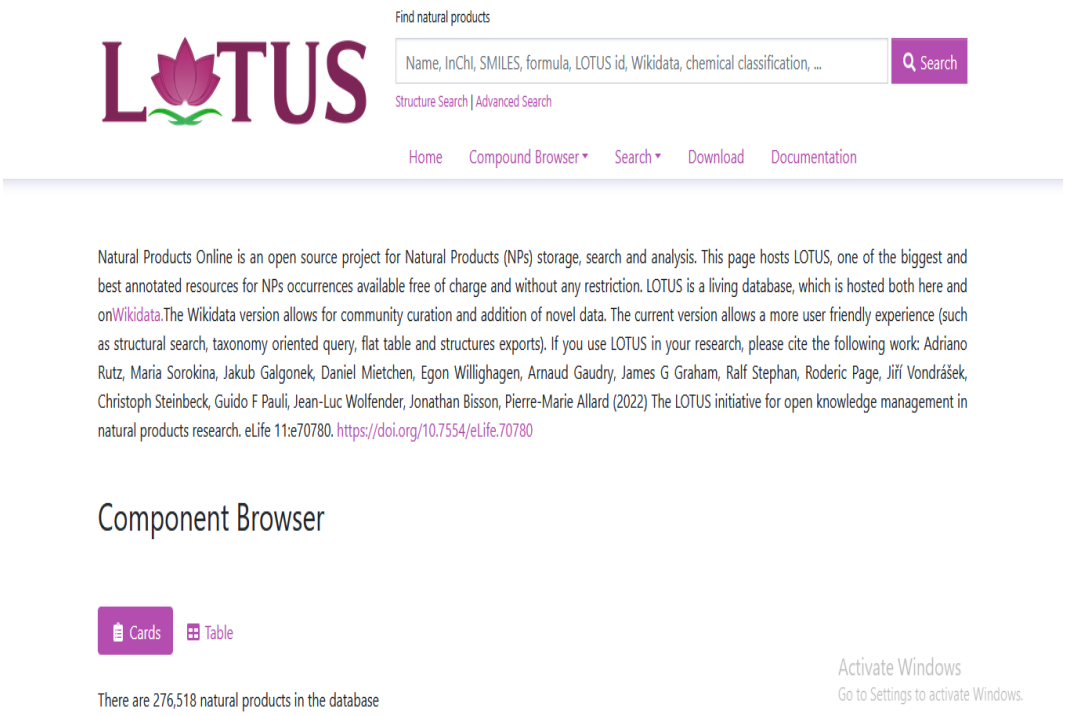
Lampiran 7. Perangkat Lunak YASARA-*Structure*



Lampiran 8. Perangkat Lunak *Discovery Studio Visualizer*



Lampiran 9. *Lotus Natural Product*



Lampiran 10. Formulir Bimbingan Skripsi

UNISA
UNIVERSITAS 'AISYIYAH PALEMBANG
FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI (FKesT)
PROGRAM STUDI :
S1 FARMASI
Jl. Kol. H. Burlan – Lr. M. Husin KM. 7,5 No. 907 Kota Palembang, Kode Pos 30152, Telp (0711) 417135
Email: farmasi@unisa-palembang.ac.id

FORMULIR BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Ravica Syafitri
NIM : 214820103021
Nama Pembimbing : 1. Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M.Farm
2. Deden Mula Saputra, S.ThI,M.ud
Judul Skripsi : Eksplorasi Ligan Anti-Asma Berbasis Tumbuhan Dalam Al-Qur'an Dan Hadits Dengan Metode *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS)

No.	Tanggal Konsultasi	Keterangan	Paraf Pembimbing
1.	23 mei 2025	membahas mengenai id pembahasan skripsi	
2.	26 mei 2025	membahas mengenai pencarian referensi jurnal untuk membuat pembahasan	
3.	27 mei 2025	Evaluasi Penulisan Bab IV	
4.	2 Juni 2025	Revisi format penulisan dan isi bab IV	
5.	4 Juni 2025	Revisi Bab IV	
6.	1 July 2025	Revisi tabel Pada bab IV	
7.	3 July 2025	Revisi Gambar hasil Penelitian	
8.	4 July 2025	Revisi metode kerja Penelitian	
9.	9 July 2025	Revisi bab V kesimpulan dan saran	
10.	17 July 2025	Revisi keseluruhan Bab	
11.	20 July 2025	Revisi abstrak	
12.	22 July 2025.	revisi Bab II	
13.	24 July 2025	Revisi Bab IV	
14.	26 January 2025	Revisi kesimpulan	
15.	2 agustus 2025	Revisi mengenai Referensi.	

Lampiran 11. Pernyataan Selesai Revisi Skripsi

FAKULTAS ILMU KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
'AISYIYAH PALEMBANG
PROGRAM STUDI S1 FARMASI
Jl. Kol. H. Burlian –Lr. M. Husin No. 907 RT. 12/RW. 04 Kel. Karya Baru
Kec. Alang-alang LebarKM. 7,5 Palembang 30152 Telp. 0711-421981
www.unisa-palembang.ac.id farmasi.aisyiyah@gmail.com

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَٰنِ الرَّحِيمِ

FORMULIR
PERNYATAAN SELESAI REVISI NASKAH SKRIPSI*)
(S-06)

Yang bertandatangan dibawah ini, tim penguji ~~Skripsi 1~~/ Skripsi 2*):

Nama Mahasiswa : Ravica Syafitri

NIM : 214820103021

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

Pembimbing 1 : Dr. Gerry Nugraha,M.Sc., M.Farm.

Pembimbing 2 : Deden Mula Saputra, S.Th.I., M.Ud.

Tanggal Ujian : 14 Agustus 2025

Menerangkan bahwa ~~naskah Proposal~~/ Skripsi*) telah **selesai** direvisi oleh tim penguji.

Nama	Tanda Tangan	Tanggal
1. Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., M.Farm.		17/09/2025
2. Deden Mula Saputra, S.Th.I., M.Ud.		17/09/2025
3. Dr. Amrullah, M.Pd.I.		17/09/2025
4. Suprayetno, S.Si., M.T.		5/09/2025

*) : Coret yang tidak perlu.