

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



**OLEH :**  
**RISNA PINISIA**  
**214820103023**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI**  
**FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI**  
**UNIVERSITAS AISYIAH PALEMBANG**  
**2025**

**SKRIPSI**

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

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



**OLEH :**  
**RISNA PINISIA**  
**214820103023**

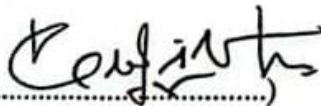
**PROGRAM STUDI S1 FARMASI**  
**FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI**  
**UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG**  
**2025**

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

Oleh:  
Risna Pinisia  
214820103023

**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. Olvy Indriani, M.Farm  
NIK.2014.10.025

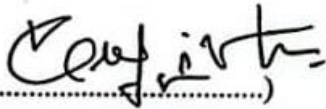
**LEMBAR PENGESAHAN**  
**SKRIPSI**  
**MEMBANGUN PROTOKOL *STRUCTURE-BASED VIRTUAL***  
***SCREENING* (SBVS) UNTUK IDENTIFIKASI KANDIDAT**  
**LIGAN ANTI-ASMA**

Oleh:  
Risna Pinisia  
214820103023

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

()

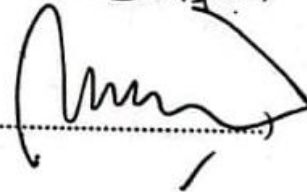
II. Suprayetno, S.Si., MT  
NIK. 2015.10.075

()

III. Ade Oktasari, 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

## LEMBAR PERSEMBAHAN

Dengan penuh rasa syukur kepada Allah SWT, yang menghembuskan napas kehidupan dan menuntun setiap langkah, karya ini kupersembahkan sebagai wujud kecil dari perjalanan panjang yang tak selalu mudah, namun penuh pelajaran, doa, dan cinta.

Karya ini kupersembahkan kepada:

- ❖ Ayah dan Ibu tercinta, yang namanya kusebut dalam setiap doa, yang kasih sayangnya mengalir tanpa batas, yang peluh dan letihnya menjadi jalan bagi mimpiku. Segala doa, kesabaran, dan pengorbanan kalian adalah cahaya yang menuntunku hingga ke titik ini.
- ❖ A'a, kakak-kakak, teteh-tetehku, dan keponak-keponakanku tersayang, yang menjadi tempatku kembali, yang tawa dan canda menyembuhkan, yang dukungannya membuat langkahku terasa ringan.
- ❖ Dosen pembimbing tercinta, Bapak Dr. Gerry Nugraha, M.Sc., dan Bapak Suprayetno, S.Si., MT., yang dengan sabar membimbing, mengarahkan dengan penuh kesungguhan, dan membagikan ilmu serta pengalaman berharga, hingga skripsi ini dapat terselesaikan. Setiap saran dan koreksi yang diberikan menjadi cahaya penerang di jalan penelitian ini.
- ❖ Teman-temanku, Imeng, Petrus, Vika, Apen dan teman-teman satu angkatanku yang setia, yang hadir bukan hanya di saat bahagia, tetapi juga di tengah badai, menjadi telinga yang mendengar, pundak yang menguatkan, dan tangan yang selalu siap menggenggam.

❖ Diriku sendiri, yang bertahan ketika dunia terasa berat, yang memilih bangkit di saat ingin menyerah, yang terus melangkah meski jalan kadang samar.

Semoga karya sederhana ini dapat menjadi bukti bahwa sebuah mimpi layak diperjuangkan, dan bahwa cinta, doa, dan ketulusan adalah kekuatan yang mampu mengubah segalanya.

## **RIWAYAT HIDUP**



### **IDENTITAS DIRI**

Nama : Risna Pinisia  
NIM : 214820103023  
Tempat/Tanggal Lahir : Rantau Sialang/31 Januari 2001  
Jenis Kelamin : Perempuan  
Agama : Islam  
Kewarganegaraan : Indonesia  
Alamat : Dusun 1, RT/RW 002/001 Desa Rantau Sialang,  
Kec. Sungai Keruh, Kabupaten Musi Banyuasin,  
Provinsi Sumatera Selatan  
No. Telepon : 083142910131

### **RIWAYAT PENDIDIKAN**

Tahun 2007-2013 : SD Negeri 1 Rantau Sialang  
Tahun 2013-2016 : SMP Negeri 1 Sekayu  
Tahun 2016-2019 : SMK Farmasi Pembina Palembang  
Tahun 2021-2025 : Program Studi S1 Farmasi – Fakultas Kesehatan  
dan Teknologi Universitas Aisyiyah Palembang

## SURAT PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama Mahasiswa : Risna Pinisia  
Tempat/Tanggal Lahir : 214820103023  
Jenis Kelamin : S1 Farmasi  
Alamat : Dusun 1, RT/RW 002/001 Desa Rantau Sialang,  
Kec. Sungai Keruh, Kab. Musi Banyuasin,  
Provinsi Sumatera Selatan  
No. Telepon/HP : 083142910131  
Judul Penelitian : Membangun Protokol *Structure-Based Virtual  
Screening* (SBVS) untuk Identifikasi Kandidat  
Ligan Anti-Asma  
Dipublikasikan di : Universitas Aisyiyah Palembang

Dengan ini menyatakan dengan sebenarnya bahwa penelitian ini dibuat sendiri (bukan plagiat). Apabila di kemudian hari saya memberi pernyataan yang tidak benar sehubungan dengan pernyataan di atas, maka saya bersedia dituntut secara hukum.

Palembang, Agustus 2025

Yang menyatakan



Risna Pinisia  
214820103023

## SURAT PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama Mahasiswa : Risna Pinisia  
Tempat/Tanggal Lahir : 214820103023  
Jenis Kelamin : S1 Farmasi  
Alamat : Dusun 1, RT/RW 002/001 Desa Rantau Sialang,  
Kec. Sungai Keruh, Kab. Musi Banyuasin,  
Provinsi Sumatera Selatan  
No. Telepon/HP : 083142910131  
Judul Penelitian : Membangun Protokol *Structure-Based Virtual  
Screening* (SBVS) untuk Identifikasi Kandidat  
Ligan Anti-Asma  
Dipublikasikan di : Universitas Aisyiyah Palembang

Dengan ini menyatakan dengan sebenarnya bahwa penelitian ini dibuat sendiri (bukan plagiat). Apabila di kemudian hari saya memberi pernyataan yang tidak benar sehubungan dengan pernyataan di atas, maka saya bersedia dituntut secara hukum.

Palembang, Agustus 2025

Yang menyatakan



Risna Pinisia  
214820103023

## KATA PENGANTAR



*Assalamu'alaikum. Warahmatullahi. Wabarakatuh.*

Dengan memanjatkan puji syukur kepada Allah SWT, karena berkat rahmat, hidayah, dan karunia-Nya sehingga saya dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Membangun Protokol *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) Untuk Identifikasi Kandidat Ligan Anti-Asma”.

Penulis sepenuhnya menyadari bahwa dalam penyusunan skripsi ini tidak akan selesai tanpa bantuan dari berbagai pihak. Karena itu pada kesempatan ini saya ingin mengucapkan terima kasih kepada :

1. Bapak Khoirin, 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) Universitas Aisyiyah Palembang
3. Ibu apt. Onny Indriani, M.Farm, selaku Ketua Program Studi S1 Farmasi Universitas Aisyiyah Palembang dan penguji II yang telah meluangkan waktunya untuk menguji dan telah memberikan banyak saran.
4. Bapak Dr. Gerry Nugraha, M.Sc, M.Farm, selaku pembimbing I dan penguji yang telah meluangkan waktunya untuk menguji dan telah memberikan banyak saran.

5. Bapak Suprayetno, S.Si., MT, selaku Pembimbing II dan penguji yang telah meluangkan waktunya untuk menguji dan telah memberikan banyak saran.
6. Ibu Ade Oktasari, S.Si, M.Sc, selaku penguji I yang telah meluangkan waktunya untuk menguji dan telah memberikan banyak saran.
7. Bapak dan Ibu dosen staf Universitas Aisyiyah Palembang yang telah banyak memberikan bantuan kepada penulis.
8. Bapak, Ibu dan Saudaraku tercinta yang telah memberikan dorongan baik moral maupun material dan juga telah berjuang keras untuk keberhasilanku.
9. Semua pihak yang telah memberikan bantuan serta dukungannya kepada peneliti.

Sesungguhnya masih banyak lagi pihak yang membantu, namun tidak sempat peneliti sebutkan satu persatu disini. Untuk itu, peneliti 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, Agustus 2025



Risna Piniusia  
214820103023

UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG  
FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI  
PROGRAM STUDI S1 FARMASI

Skripsi, Agustus 2025

Risna Pinisia

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

ABSTRAK

**Latar Belakang:** Asma merupakan penyakit inflamasi kronis saluran pernapasan dengan prevalensi tinggi di seluruh dunia, termasuk di Indonesia. Terapi jangka panjang sering menimbulkan efek samping dan biaya tinggi, sehingga diperlukan pencarian kandidat obat baru yang lebih efektif. Pendekatan *Structure-Based Virtual Screening* (SBVS) berbasis kimia komputasi berpotensi mempercepat identifikasi ligan aktif terhadap target molekuler asma. **Tujuan:** Penelitian ini bertujuan untuk membangun protokol SBVS dalam mengidentifikasi ligan kandidat anti-asma dengan memanfaatkan obat penuntun yang sudah digunakan secara klinis. **Metode:** Penelitian ini merupakan penelitian eksperimental dengan pendekatan *Computer Aided Drug Discovery* (CADD). Tahapan penelitian meliputi analisis *network pharmacology* untuk mengidentifikasi target protein yang relevan, *molecular docking* untuk memprediksi interaksi ligan–reseptor, serta *molecular dynamics* (MD) untuk mengevaluasi kestabilan kompleks ligan–reseptor. **Hasil:** Analisis *network pharmacology* menghasilkan empat reseptor relevan (ADRB2, NOS1, HRH1, dan NOS3). Uji *molecular docking* menunjukkan bahwa reseptor ADRB2 (kode PDB: 2RH1) memiliki interaksi paling stabil dengan ligan fenoterol, terutama melalui residu Asp113. Simulasi MD selama 20 ns memperlihatkan kestabilan interaksi dengan nilai RMSD < 2 Å sepanjang simulasi serta energi bebas ikatan paling stabil sebesar -10,8660 kkal/mol. **Kesimpulan:** Penelitian ini berhasil membangun protokol SBVS untuk pencarian kandidat ligan anti-asma. Fenoterol teridentifikasi sebagai ligan dengan interaksi stabil pada reseptor ADRB2, sehingga berpotensi dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat obat anti-asma baru.

**Kata kunci** : Asma, SBVS, *molecular docking*, *molecular dynamics*, ADRB2

**Daftar Pustaka** : 50 (2012-2025)

**UNIVERSITY OF AISYIYAH PALEMBANG  
FACULTY OF HEALTH AND TECHNOLOGY  
BACHELOR'S DEGREE PROGRAM IN PHARMACY**

**Thesis, August 2025**

**Risna Pinisia**

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

**ABSTRACT**

**Background:** Asthma is a chronic inflammatory respiratory disease with a high prevalence worldwide, including in Indonesia. Long-term therapy often causes side effects and high costs, making the discovery of novel and more effective drug candidates essential. Structure-Based Virtual Screening (SBVS) using computational chemistry offers a promising approach to accelerate the identification of active ligands against asthma molecular targets. **Objective:** This study aimed to establish an SBVS protocol for identifying anti-asthma ligand candidates by utilizing clinically established reference drugs. **Methods:** This experimental study employed a Computer Aided Drug Discovery (CADD) approach. The research workflow included network pharmacology to identify relevant target proteins, molecular docking to predict ligand–receptor interactions, and molecular dynamics (MD) simulations to assess the stability of ligand–receptor complexes. **Results:** Network pharmacology analysis identified four relevant receptors (ADRB2, NOS1, HRH1, and NOS3). Molecular docking results revealed ADRB2 (PDB ID: 2RH1) as the most relevant receptor, with fenoterol showing the most stable binding through key residue Asp113. A 20 ns MD simulation confirmed the stability of the complex with RMSD values consistently below 2 Å and the lowest free binding energy of -10.8660 kcal/mol. **Conclusion:** This study successfully established an SBVS protocol for identifying potential anti-asthma ligands. Fenoterol was identified as a ligand with stable interaction at ADRB2, suggesting its potential as a novel anti-asthma drug candidate.

**Keywords** : Asthma, SBVS, Molecular Docking, Molecular Dynamics, ADRB2

**References** : 50 (2012-2025)

## DAFTAR ISI

HALAMAN SAMBUNG .....	i
HALAMAN JUDUL.....	ii
LEMBAR PERSETUJUAN.....	iii
LEMBAR PENGESAHAN .....	iv
LEMBAR PERSEMBAHAN .....	v
RIWAYAT HIDUP .....	vii
SURAT PERNYATAAN .....	viii
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI .....	ix
KATA PENGANTAR .....	x
ABSTRAK .....	xii
ABSTRACT .....	xiii
DAFTAR ISI.....	xiv
DAFTAR TABEL.....	xvi
DAFTAR GAMBAR .....	xvii
DAFTAR LAMPIRAN .....	xix
DAFTAR ISTILAH DAN SINGKATAN .....	xx
<b>BAB I. PENDAHULUAN .....</b>	<b>1</b>
A. Latar Belakang .....	1
B. Rumusan Masalah .....	3
C. Tujuan Penelitian .....	4
D. Manfaat Penelitian .....	4
E. Ruang Lingkung dan Batasan Penelitian .....	5
<b>BAB II. TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI .....</b>	<b>6</b>
A. Kajian Pustaka .....	6
1. Asma .....	6
2. Penatalaksanaan Pasien Asma .....	7

3. Obat-obatan Anti-asma Sebagai Senyawa Penuntun .....	9
4. Kimia Komputasi .....	13
5. Aplikasi Database Penunjang .....	16
B. Landasan Teori .....	18
<b>BAB III. METODE PENELITIAN .....</b>	<b>20</b>
A. Desain Penelitian .....	20
B. Waktu dan Tempat Penelitian .....	20
C. Alat dan Bahan .....	20
D. Prosedur Penelitian .....	21
<b>BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>26</b>
A. <i>Network Pharmacology</i> .....	26
1. Identifikasi aktivitas obat penuntun .....	26
2. Identifikasi reseptor .....	28
3. Analisis <i>network pharmacology</i> .....	30
B. <i>Molecular Docking</i> .....	32
1. Preparasi dan pemurnian reseptor .....	32
2. Preparasi ligan dan <i>molecular docking</i> .....	33
3. Analisis interaksi ligan dengan asam amino .....	35
4. Pemilihan ligan dan reseptor yang paling relevan .....	36
5. <i>Discovery studio</i> .....	38
C. <i>Molecular Dynamic (MD)</i> .....	39
1. Analisis <i>molecular dynamic (MD)</i> .....	39
2. Identifikasi interaksi ligan di titik aktif reseptor .....	41
3. Perhitungan nilai RMSD .....	42
4. Perhitungan nilai <i>free binding energy</i> .....	43
<b>BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN .....</b>	<b>45</b>
A. Kesimpulan .....	45
B. Saran .....	45
DAFTAR PUSTAKA .....	46
DAFTAR LAMPIRAN .....	51

## DAFTAR TABEL

1. Struktur kimia obat-obatan penuntun anti-asma .....	27
2. Tabel 4.2 Data hasil <i>pass online</i> .....	27
3. Tabel 4.3 Hasil analisis interaksi ligan dengan asam amino .....	35
4. Tabel 4.4 Pemilihan ligan dan reseptor .....	36

## DAFTAR GAMBAR

1. Struktur Kimia Salbutamol .....	10
2. Stuktur Kimia Terbutalin .....	10
3. Struktur Kimia Fenoterol .....	11
4. Struktur Kimia Procaterol .....	12
5. Struktur Kimia Pirbuterol .....	12
6. Alur Prosedur Penelitian .....	25
7. Diagram Venn Interaksi Antara Obat, Reseptor, dan Penyakit .....	30
8. Reseptor-reseptor yang Relevan dengan Obat Penuntun dan Penyakit ...	31
9. Reseptor-reseptor yang telah Dimurnikan .....	33
10. Ligan dari Reseptor 2RH1 .....	34
11. <i>Grid Box</i> Reseptor 1M9J, 2RH1, 4D1N .....	34
12. Hasil <i>Docking</i> Reseptor 2RH1 .....	35
13. Referensi Asam Amino Reseptor 1M9J .....	37
14. Referensi Asam Amino Reseptor 2RH1 .....	37
15. Referensi Asam Amino Reseptor 4D1N .....	37
16. Asam Amino pada Reseptor 2RH1 .....	38
17. Reseptor Terpilih Dengan Kode 2RH1 .....	39
18. Hasil Interaksi Ligan per-Residu Dari Reseptor Molekul A .....	40
19. Grafik Protein Terlarut/Residu Asam Nukleat RMSF .....	41
20. Asam Amino pada Reseptor 2RH1 .....	41
21. Grafik RMSD Å vs Waktu .....	42

22. Ikatan Hidrogen yang Terbentuk dengan Asp113 Menggunakan Aplikasi YASARA- <i>Structure</i> .....	43
---	----

## DAFTAR LAMPIRAN

1. Surat izin penelitian .....	51
2. Lembar bimbingan skripsi .....	52
3. Data hasil <i>swissargetprediction</i> .....	53
4. Data 177 gen atau protein yang terkait dengan penyakit asma pada laman <i>GeneCards</i> .....	55
5. Perintah <i>docking</i> pada <i>YASARA-Structure</i> .....	59
6. Perintah <i>md_runmembrane</i> .....	60
7. Perintah <i>md_convert-sim2pdb.mcr</i> .....	63
8. Perintah <i>BEcalculation.mcr</i> .....	64
9. Perintah <i>md_analyze.mcr</i> .....	65

## DAFTAR ISTILAH DAN SINGKATAN

CADD	: <i>Computer Aided Drug Desain</i>
FDA	: <i>Food and Drug Administration</i>
MD	: <i>Molecular Docking</i>
SBVS	: <i>Structure-Based Virtual Screening</i>
RMSD	: <i>Root Mean Square Deviation</i>
RMSF	: <i>Root Mean Square Fluctuation</i>
RNA	: <i>Ribonukleat Acid</i>
PDB	: <i>Protein Data Bank</i>
WHO	: <i>World Health Organization</i>