

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)