

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA BIOAKTIF DAUN PEGAGAN
(*Centella asiatica* (L.) Urban) SEBAGAI INHIBITOR ENZIM
ASETILKOLINESTERASE UNTUK KANDIDAT TERAPI
ALZHEIMER**

SKRIPSI



HILMA TRI ANNISA

10016122100

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2026**

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA BIOAKTIF DAUN PEGAGAN
(*Centella asiatica* (L.) Urban) SEBAGAI INHIBITOR ENZIM
ASETILKOLINESTERASE UNTUK KANDIDAT TERAPI
ALZHEIMER**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar
Sarjana Farmasi**



HILMA TRI ANNISA

10016122100

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2026**

ABSTRAK

Studi *In Silico* Senyawa Bioaktif Daun Pegagan (*Centella asiatica* (L.) Urban) sebagai Inhibitor Enzim Asetilkolinesterase untuk Kandidat Terapi Alzheimer

Hilma Tri Annisa

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Penyakit Alzheimer berkaitan dengan penurunan kadar asetilkolin akibat aktivitas enzim asetilkolinesterase (AChE), sehingga penghambatan AChE menjadi salah satu strategi terapi simptomatik. Penelitian ini bertujuan mengevaluasi potensi 47 senyawa bioaktif daun pegagan (*Centella asiatica* (L.) Urban) sebagai kandidat inhibitor AChE melalui pendekatan *in silico*. Protein target yang digunakan yaitu AChE 4EY7, 6O4W, dan 7E3H. Tahapan penelitian meliputi preparasi protein dan ligan, validasi *docking*, *molecular docking*, visualisasi interaksi, skrining *drug-likeness*, prediksi ADMET, serta simulasi *molecular dynamics* 100 ns berdasarkan parameter RMSD, RMSF, dan MM-GBSA. Hasil validasi menunjukkan nilai RMSD *redocking* 4EY7, 6O4W, dan 7E3H masing-masing 0,6260 Å, 0,6371 Å, dan 1,1182 Å, sehingga metode dinyatakan valid. Hasil analisis menunjukkan bahwa naringin, labiatenik acid, 3-O-β-D-glucopyranosyl sitosterol, dan turunan dicaffeoylquinic acid memiliki potensi pengikatan yang baik terhadap AChE. Berdasarkan integrasi hasil *docking*, interaksi residu penting, ADMET, RMSD, RMSF, dan MM-GBSA, naringin pada AChE 4EY7 dipilih sebagai kandidat paling potensial karena menunjukkan hasil yang paling seimbang dan stabil. Dengan demikian, naringin berpotensi dikembangkan sebagai kandidat inhibitor AChE dari daun pegagan, tetapi masih memerlukan validasi *in vitro* dan *in vivo*.

Kata kunci: asetilkolinesterase, Alzheimer, *Centella asiatica*, *in silico*, naringin

ABSTRACT

Alzheimer's disease is associated with decreased acetylcholine levels due to acetylcholinesterase (AChE) activity; therefore, AChE inhibition is one of the symptomatic therapeutic strategies. This study aimed to evaluate the potential of 47 bioactive compounds from gotu kola leaves (*Centella asiatica* (L.) Urban) as AChE inhibitor candidates using an *in silico* approach. The AChE protein targets used were 4EY7, 6O4W, and 7E3H. The research stages included protein and ligand preparation, docking validation, molecular docking, interaction visualization, drug-likeness screening, ADMET prediction, and 100 ns molecular dynamics simulation based on RMSD, RMSF, and MM-GBSA parameters. The validation results showed redocking RMSD values of 0.6260 Å, 0.6371 Å, and 1.1182 Å for 4EY7, 6O4W, and 7E3H, respectively, indicating that the docking method was valid. The analysis showed that naringin, labiatenik acid, 3-O-β-D-glucopyranosyl sitosterol, and dicaffeoylquinic acid derivatives had good binding potential against AChE. Based on the integrated evaluation of docking results, key residue interactions, ADMET, RMSD, RMSF, and MM-GBSA, naringin bound to AChE 4EY7 was selected as the most potential candidate due to its balanced and stable results. Therefore, naringin has potential for further development as an AChE inhibitor candidate from *C. asiatica* leaves, but still requires *in vitro* and *in vivo* validation.

Keywords: acetylcholinesterase, Alzheimer's disease, *Centella asiatica*, *in silico*, naringin