

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM KACANG
SACHA INCHI (*Plukenetia volubilis* L.) SEBAGAI ANTIKANKER
LAMBUNG**

SKRIPSI



SILMA LUTFI FARWAH

10016122178

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

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM KACANG
SACHA INCHI (*Plukenetia volubilis* L.) SEBAGAI ANTIKANKER
LAMBUNG**

SKRIPSI



SILMA LUTFI FARWAH

10016122178

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

ABSTRAK

Studi *In Silico* Senyawa yang Terkandung dalam Kacang Sacha Inchi (*Plukenetia volubilis* L.) sebagai Antikanker Lambung

Silma Lutfi Farwah

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Kanker lambung tetap menjadi salah satu jenis kanker paling agresif di seluruh dunia karena tingkat insidens dan angka kematiannya yang tinggi. Meskipun penghambat tirosin kinase telah menunjukkan kemanjuran terapeutik, penggunaannya sering kali dikaitkan dengan efek samping, sehingga menyoroti kebutuhan akan agen antikanker yang lebih aman. Sacha Inchi (*Plukenetia volubilis* L.) dikenal kaya akan senyawa bioaktif, terutama asam lemak dan senyawa fenolik dengan aktivitas antioksidan alami. Penelitian ini mengevaluasi potensi senyawa *Plukenetia volubilis* L. sebagai inhibitor tirosin kinase c-Met (PDB ID: 3DKC) melalui pendekatan *in silico* terintegrasi menggunakan SwissADME, Autodock, PyRx, AMBER 22, dan pkCSM. Dari 28 senyawa yang dianalisis, 10 memenuhi kriteria *drug-likeness*. Validasi *redocking* adenosine-5'-triphosphate menghasilkan RMSD 1,31 Å, menunjukkan metode docking yang valid. Apigenin, pinoresinol, asam mikofenolat, dan oleuropein aglikon menunjukkan afinitas terbaik dengan energi ikatan masing-masing -7,77, -7,57, -7,24, dan -6,90 kcal/mol. Apigenin menunjukkan stabilitas kompleks yang baik selama simulasi *molecular dynamic* serta profil farmakokinetik yang menguntungkan tanpa prediksi hepatotoksitas. Dengan demikian, apigenin merupakan kandidat paling potensial sebagai inhibitor c-Met untuk pengembangan antikanker lambung dan memerlukan validasi eksperimental lebih lanjut.

Kata Kunci: Apigenin, tirosin kinase c-Met, kanker lambung, *molecular dynamic*, *Plukenetia volubilis* L.

Abstract

Gastric cancer remains one of the most aggressive cancers worldwide due to its high incidence and mortality rates. Although tyrosine kinase inhibitors have demonstrated therapeutic efficacy, their use is often associated with side effects, highlighting the need for safer anticancer agents. Sacha Inchi (*Plukenetia volubilis* L.) is known to be rich in bioactive compounds, particularly fatty acids and phenolic compounds with natural antioxidant activity. This study evaluated the potential of *Plukenetia volubilis* L. compounds as inhibitors of the c-Met tyrosine kinase (PDB ID: 3DKC) using an integrated *in silico* approach involving SwissADME, PyRx, AMBER 22, and pkCSM. Of the 28 compounds analyzed, 10 met the drug-likeness criteria. Redocking validation of adenosine-5'-triphosphate yielded an RMSD of 1.31 Å, indicating a valid docking method. Apigenin, pinoresinol, mycophenolic acid, and oleuropein aglycone demonstrated the best binding affinities, with binding energies of -7.77, -7.57, -7.24, and -6.90 kcal/mol, respectively. Apigenin exhibited good complex stability during molecular dynamics simulations and a favorable pharmacokinetic profile with no predicted hepatotoxicity. Thus, apigenin stands out as the most promising candidate for c-Met inhibition in the development of gastric cancer treatments and warrants further experimental validation.

Keywords: Apigenin, c-Met tyrosine kinase, gastric cancer, molecular dynamic, *Plukenetia volubilis* L.