

**STUDI IN SILICO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
TANAMAN PEGAGAN (*Centella asiatica*) SEBAGAI
ANTI-KANKER LAMBUNG**

SKRIPSI



**ANGGI ANGGRAENI
10016122202**

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

**STUDI IN SILICO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
PEGAGAN (*Centella asiatica*) SEBAGAI ANTIKANKER
LAMBUNG**

SKRIPSI

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



**ANGGI ANGGRAENI
10016122202**

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

ABSTRAK

Studi In silico Senyawa yang Terkandung dalam Tanaman Pegagan (*Centella asiatica*) sebagai Antikanker Lambung

Anggi Anggraeni

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Latar Belakang: Kanker lambung tetap menjadi masalah kesehatan utama karena sering terdeteksi pada stadium lanjut dan terapi konvensional dapat menimbulkan toksisitas yang signifikan. *Centella asiatica* mengandung triterpenoid, flavonoid, dan senyawa bioaktif terkait yang dilaporkan memiliki aktivitas antikanker. **Tujuan:** Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa yang terkandung dalam *Centella asiatica* sebagai kandidat antikanker lambung yang menargetkan reseptor tirosin kinase c-Met melalui pendekatan in silico. **Metode:** Tiga puluh lima senyawa diambil dari PubChem dan dilakukan docking terhadap reseptor c-Met dengan kode PDB 5EOB dan 9IVB menggunakan AutoDock melalui PyRx. Validasi reseptor dilakukan dengan melakukan redocking ligan asli, diikuti dengan persiapan ligan, docking molekuler, visualisasi dua dan tiga dimensi, simulasi dinamika molekuler menggunakan AMBER selama 100 ns, analisis energi bebas ikatan MMGBSA/MMPBSA, penyaringan kesesuaian obat, dan prediksi ADMET. **Hasil:** Protokol docking tersebut telah divalidasi dengan nilai RMSD sebesar 1,39 Å untuk kedua reseptor tersebut. Asam betulinat menunjukkan afinitas docking terkuat, dengan nilai afinitas ikatan sebesar (-10,67 kcal/mol) untuk 5EOB dan (-12,05 kcal/mol) untuk 9IVB. Analisis simulasi dinamika molekuler menunjukkan bahwa asam betulinat, stigmasterol, dan asam asetilursolat membentuk kompleks yang relatif stabil, sementara prediksi ADMET menunjukkan bahwa beberapa senyawa memiliki profil penyerapan yang dapat diterima namun masih memerlukan pertimbangan terkait toksisitas. **Kesimpulan:** Secara keseluruhan, senyawa *Centella asiatica*, terutama asam betulinat, memiliki potensi sebagai kandidat obat antikanker lambung yang menargetkan c-Met, meskipun masih diperlukan konfirmasi lebih lanjut melalui uji in vitro dan in vivo.

Kata kunci: *Centella asiatica*, kanker lambung, c-Met, docking molekuler, simulasi dinamika molekuler, ADMET.

ABSTRACT

Background: Gastric cancer remains a major health problem because it is frequently detected at an advanced stage and conventional therapy may produce substantial toxicity. *Centella asiatica* contains triterpenoids, flavonoids, and related bioactive compounds that have been reported to possess anticancer activity. **Objective:** This study aimed to evaluate the potential of compounds contained in *Centella asiatica* as gastric anticancer candidates targeting the c-Met receptor tyrosine kinase through an in silico approach. **Methods:** Thirty-five compounds were retrieved from PubChem and docked against c-Met receptors with PDB IDs 5EOB and 9IVB using AutoDock via PyRx. Receptor validation was performed by redocking native ligands, followed by ligand preparation, molecular docking, two- and three-dimensional visualization, molecular dynamics simulation using AMBER for 100 ns, MMGBSA/MMPBSA binding free energy analysis, drug-likeness screening, and ADMET prediction. **Results:** The docking protocol was validated with RMSD values of 1.39 Å for both receptors. Betulinic acid exhibited the strongest docking affinity, with binding affinity values of (-10.67 kcal/mol) for 5EOB and (-12.05 kcal/mol) for 9IVB. Molecular dynamics analysis indicated that betulinic acid, stigmasterol, and acetylursolic acid formed relatively stable complexes, while ADMET prediction showed that several compounds had acceptable absorption profiles but still required consideration of toxicity. **Conclusion:** Overall, *Centella asiatica* compounds, especially betulinic acid, have potential as c-Met-targeted gastric anticancer candidates, although further in vitro and in vivo confirmation is required.

Keywords: *Centella asiatica*, gastric cancer, c-Met, molecular docking, molecular dynamics, ADMET.