

**ANALISIS NETWORK *PHARMACOLOGY* DAN VALIDASI *IN SILICO* SENYAWA BIOAKTIF DAUN BELIMBING WULUH
(*Averrhoa bilimbi L.*) UNTUK PENGEMBANGAN KANDIDAT
ANTIANKER PARU-PARU**

SKRIPSI

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



NURLIA ADIJAYA

10016122061

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

ABSTRAK

Analisis *Network Pharmacology* dan Validasi *In Silico* Senyawa Bioaktif Daun Belimbing Wuluh (*Averrhoa bilimbi* L.) untuk Pengembangan Kandidat Antikanker Paru-Paru

Nurlia Adijaya

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Kanker paru-paru merupakan penyebab utama kematian terkait kanker di seluruh dunia, sehingga diperlukan pengembangan kandidat antikanker yang efektif dengan mekanisme kerja multitarget. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi senyawa aktif dari daun belimbing wuluh (*Averrhoa bilimbi* L.) sebagai kandidat pengobatan kanker paru-paru menggunakan pendekatan *network pharmacology*, *molecular docking* dan *molecular dynamics*. Dari 22 metabolit sekunder yang diperoleh dari KNApSACk, sebanyak 19 senyawa memenuhi kriteria *drug-likeness* berdasarkan “Rule of Five” Lipinski melalui analisis SwissADME. Protein target yang diprediksi menggunakan SwissTargetPrediction, TargetNet, dan SuperPred dikombinasikan dengan gen kanker paru-paru dari GeneCards untuk mengidentifikasi gen yang sama. Analisis interaksi protein–protein, *gene ontology*, jalur KEGG dan *hub gene* mengidentifikasi STAT3 sebagai target utama. STAT3 (PDB ID: 6NJS) digunakan untuk *molecular docking* dan simulasi *molecular dynamics* selama 50 ns. Senyawa tersebut memodulasi protein yang terlibat dalam proliferasi sel, apoptosis, inflamasi dan siklus sel melalui jalur PI3K–Akt dan IL-6/JAK/STAT3. Codonopsine menunjukkan interaksi terkuat dan membentuk kompleks paling stabil dengan STAT3 dibandingkan senyawa lain dan Gefitinib selama simulasi.

Kata kunci: Daun belimbing wuluh, kanker paru-paru, *network pharmacology*, *molecular docking*, *codonopsine*.

Abstract

Lung cancer is the leading cause of cancer-related death worldwide, highlighting the need for effective multi-target anticancer candidates. This study aimed to identify active compounds from Belimbing wuluh (*Averrhoa bilimbi* L.) leaves as potential lung cancer treatments using network pharmacology, molecular docking, and molecular dynamics. Of 22 secondary metabolites obtained from KNApSACk, 19 met Lipinski's “Rule of Five” drug-likeness criteria based on SwissADME analysis. Target proteins predicted using SwissTargetPrediction, TargetNet, and SuperPred were combined with lung cancer genes from GeneCards to identify common genes. Protein–protein interaction, gene ontology, KEGG pathway, and hub gene analyses identified STAT3 as the key target. STAT3 (PDB ID: 6NJS) was used for molecular docking and 50 ns molecular dynamics simulation. The compounds modulated proteins involved in cell proliferation, apoptosis, inflammation, and the cell cycle through the PI3K–Akt and IL-6/JAK/STAT3 pathways. Codonopsine showed the strongest interaction and formed the most stable complex with STAT3 compared with other compounds and Gefitinib during the simulation.

Keywords: *Averrhoa bilimbi* L., lung cancer, *network pharmacology*, STAT3, *molecular docking*, *codonopsine*.