

**ISOLASI METABOLIT SEKUNDER DAUN TUMBUHAN
OBAT LEGUNDI (*Vitex trifolia* L) SEBAGAI SENYAWA ANTI-
KANKER SEL MCF-7**

TESIS



OLEH :

ZIL ARIFAH

NIM : 2220412003

PROGRAM STUDI MAGISTER

DEPARTEMEN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2024

**ISOLASI METABOLIT SEKUNDER DAUN TUMBUHAN
OBAT LEGUNDI (*Vitex trifolia* L) SEBAGAI SENYAWA ANTI-
KANKER SEL MCF-7**

TESIS



PROGRAM STUDI MAGISTER

DEPARTEMEN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2024

ISOLASI METABOLIT SEKUNDER DAUN TUMBUHAN OBAT LEGUNDI (*Vitex trifolia* L) SEBAGAI SENYAWA ANTI- KANKER SEL MCF-7

Zil Arifah, Mai Efdi, Syafrizayanti

A B S T R A K

Vitex trifolia L yang dikenal juga “legundi” merupakan tumbuhan herbal yang digunakan sebagai obat untuk mengobati berbagai penyakit seperti batuk, haid tidak teratur, pemulihan pasca melahirkan, demam, peradangan, serta ditemukan memiliki kemampuan dalam melawan kanker kolorektan dan kanker servik. Penelitian ini bertujuan untuk mengisolasi senyawa metabolit sekunder dari daun *Vitex trifolia* L dan melihat kemampuannya dalam melawan sel kanker payudara. Metode yang digunakan ialah isolasi senyawa menggunakan kromatografi kolom. Karakterisasi struktur senyawa dengan UV-VIS, FTIR dan NMR. Uji sitotoksik dengan metode MTT serta analisis *in-silico* dengan metode *molecular docking*. Dalam investigasi terhadap fraksi EtOAc telah berhasil diisolasi 2 jenis senyawa metabolit sekunder yaitu Vitexicarpin dan asam 4 hidroksibenzoat dan diperoleh kedua senyawa tersebut memiliki kemampuan sitotoksik yang kuat terhadap sel kanker MCF-7 dengan nilai IC_{50} berturut-turut 3,427 $\mu\text{g/mL}$ dan 8,298 $\mu\text{g/mL}$. Hasil pengujian secara *in silico* dengan melihat afinitas ikatan dan stabilitas konformasi yang terbentuk diperoleh nilai *docking score* senyawa Vitexicarpin menunjukkan pengikatan yang lebih kuat dibandingkan senyawa asam 4 hidroksibenzoat terhadap 3 protein reseptor yang diuji dengan nilai *docking score* pada protein *Estrogen Receptor* (ER) yaitu $-8,0259 \text{ kcal.mol}^{-1}$, *Progesterone Receptor* (PR) dengan nilai *docking score* $-7,4452 \text{ kcal.mol}^{-1}$ dan pada *Human Epidermal Receptor 2* (HER2) dengan nilai *docking score* $-8,3101 \text{ kcal.mol}^{-1}$. Nilai pengujian secara *in silico* senyawa Vitexicarpin dan asam 4 hidroksibenzoat memiliki relevansi dengan pengujian secara *in vitro* sehingga dapat disimpulkan senyawa hasil isolasi berpotensi sebagai senyawa anti-kanker.

Keywords: Daun *Vitex trifolia* L, isolasi, kanker payudara, *molecular docking*.

ISOLATION OF SECONDARY METABOLITES FROM THE LEAVES OF
THE MEDICINAL PLANT LEGUNDI (*Vitex trifolia* L) AS ANTI-CANCER
COMPOUNDS IN MCF-7 CELLS

Zil Arifah, Mai Efdi*, Syafrizayanti

A B S T R A C T

Vitex trifolia L, also known as "legundi", is a herbal plant that is used as medicine to treat various diseases such as coughs, irregular menstruation, postpartum recovery, fever, inflammation, and has been found to have the ability to fight colorectal cancer and cervical cancer. This research aims to isolate secondary metabolite compounds from *Vitex trifolia* L leaves and see their ability to fight MCF-7 breast cancer cells. The methods used are compound isolation using column chromatography. Compound structure characterization using UV-VIS, FTIR and NMR. Cytotoxic testing using the MTT method and in-silico analysis using the molecular docking method. In the investigation of the EtOAc fraction, 2 types of secondary metabolite compounds, namely Vitexicarpin and 4-hydroxybenzoic acid, were successfully isolated and it was found that both compounds had strong cytotoxic capabilities against MCF-7 cancer cells with IC_{50} values of 3,427 $\mu\text{g/mL}$ and 8,298 $\mu\text{g/mL}$ respectively. The results of in silico testing, by looking at the binding affinity and stability of the conformation formed, showed that the docking score value for the Vitexicarpin compound showed stronger binding than the 4-hydroxybenzoic acid compound to the 3 receptor proteins tested with the docking score value for the Estrogen Receptor (ER) protein, namely - 8,0259 kcal.mol^{-1} , Progesterone Receptor (PR) with a docking score of -7,4452 kcal.mol^{-1} and Human Epidermal Receptor 2 (HER2) with a docking score of -8,3101 kcal.mol^{-1} . The value of in silico testing for Vitexicarpin and 4-hydroxybenzoic acid compounds has relevance to in vitro testing so that it can be concluded that the isolated compounds have the potential to be anti-cancer compound.

Keywords: *Vitex trifolia* L Leaves, Isolation, Breast Cancer, Molecular Docking.