

**POTENSI EKSTRAK DARI KULIT BUAH KOPI ARABIKA
(*Coffea arabika* L.) SEBAGAI ANTI KANKER PAYUDARA PADA SEL T47D:
STUDI IN SILICO DAN IN VITRO**

SKRIPSI SARJANA BIOLOGI

OLEH:

TIO FIRMANSYAH

UNIVERSITAS ANDALAS

NIM. 2010422007

PEMBIMBING :

1. Dr. RITA MALIZA

2. KURNIADI ILHAM, S.Si., M.Si



DEPARTEMEN BIOLOGI

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2024

ABSTRAK

Kanker payudara merupakan keganasan pada jaringan payudara yang berasal dari epitel duktus maupun lobulusnya. Upaya pengobatan dan pencegahan kanker payudara terus dilakukan, salah satunya melalui pencarian obat baru dari pemanfaatan senyawa bioaktif bahan alam. Kulit buah kopi arabika (*Coffea arabica* L.) mengandung asam klorogenat, tanin, flavonoid dan polifenol yang berpotensi sebagai antikanker, namun penelitian terkaitnya masih belum maksimal dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk mengeksplorasi potensi senyawa bioaktif dari kulit buah kopi arabika (*Coffea arabica* L.) sebagai sumber antikanker payudara. Penelitian ini dilakukan dengan melihat senyawa-senyawa bioaktif ekstrak etanol kulit buah kopi arabika (*Coffea arabica* L.) yang berpotensi sebagai antikanker payudara melalui uji analisis LC-MS dan PASS-Online, aktivitas sitotoksik terhadap *cell line* kanker payudara T47D dengan variasi konsentrasi ekstrak 31.25, 62.5, 125, 250, 500 dan 1.000 µg/ mL dan *molecular docking* senyawa-senyawa yang berpotensi sebagai antikanker dari ekstrak etanol kulit buah kopi arabika (*Coffea arabica* L.) terhadap protein ERβ (PDB ID 1QKM). Pada penelitian didapatkan 35 senyawa bioaktif hasil analisis LC-MS dan terdapat 8 senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai antikanker payudara berdasarkan analisis PASS-Online, aktivitas sitotoksik terhadap *cell line* kanker payudara T47D dengan nilai IC₅₀ 138 µg/ml dan nilai afinitas ikatan senyawa bioaktif ekstrak etanol buah kopi arabika terendah dan memenuhi aturan Lipinski terdapat pada senyawa Morin terhadap protein target ERβ dengan *docking score* -7.9831 kcal.mol⁻¹ lebih rendah dibandingkan dengan *native ligand* yaitu -7.7963 kcal.mol⁻¹. Senyawa bioaktif yang terkandung di ekstrak etanol kulit buah kopi arabika (*Coffea arabica* L.) memiliki potensi sebagai antikanker payudara pada *cell line* T47D.

Kata kunci: Antikanker, *Coffea arabica*, *molecular docking*, senyawa bioaktif, *cell line* T47D

ABSTRACT

Breast cancer is a malignancy in breast tissue originating from the epithelium of the ducts or lobules. Efforts in breast cancer treatment and prevention continue, including the search for new drugs utilizing bioactive compounds from natural sources. The peel of Arabica coffee fruit (*Coffea arabica* L.) contains chlorogenic acid, tannins, flavonoids, and polyphenols, which have potential anticancer properties; however, research on this topic remains insufficient. This study aims to explore the potential of bioactive compounds from the peel of Arabica coffee fruit (*Coffea arabica* L.) as a source of breast cancer treatment. The study investigates the bioactive compounds in ethanol extracts of the peel of Arabica coffee fruit (*Coffea arabica* L.) for their potential anticancer properties using LC-MS analysis and PASS-Online, cytotoxic activity against T47D breast cancer cell lines at various extract concentrations (31.25, 62.5, 125, 250, 500, and 1.000 $\mu\text{g/mL}$), and molecular docking of the potential anticancer compounds from the ethanol extract of the peel of Arabica coffee fruit (*Coffea arabica* L.) against the ER β protein (PDB ID 1QKM). The study identified 35 bioactive compounds via LC-MS analysis, with 8 compounds showing potential anticancer properties based on PASS-Online analysis, cytotoxic activity against T47D breast cancer cell lines with an IC₅₀ value of 138 $\mu\text{g/mL}$, and the lowest binding affinity of the bioactive compounds from the ethanol extract of Arabica coffee fruit peel, which complies with Lipinski's rules, found in the compound Morin against the target protein ER β with a docking score of -7.9831 kcal/mol, compared to the native ligand at 7.7963 kcal/mol. The bioactive compounds contained in the ethanol extract of Arabica coffee fruit peel (*Coffea arabica* L.) have potential as anticancer agents against T47D breast cancer cell lines.

Keywords: *Anticancer, Coffea arabica, molecular docking, bioactive compounds, T47D cell line*