

**POTENSI EKSTRAK DAUN JAMBU TANGKALAK (*Bellucia pentamera* Naudin.) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA
TERHADAP CELL LINE T47D STUDI : *IN-SILICO* DAN *IN-VITRO***

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh:
SONA AYU PRATIWI

NIM: 2110411019

Dosen Pembimbing I : Prof. Dr. Adlis Santoni
Dosen Pembimbing II : Dr. Rita Maliza

PROGRAM STUDI SARJANA KIMIA
DEPARTEMEN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2025

INTISARI

POTENSI EKSTRAK DAUN JAMBU TANGKALAK (*Bellucia pentamera* Naudin.) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA TERHADAP CELL LINE T47D STUDI : *IN-SILICO* DAN *IN-VITRO*

Oleh:

Sona Ayu Pratiwi (2110411019)

Prof. Dr. Adlis Santoni, MS* ; Dr. Rita Maliza*

*Pembimbing

Kanker payudara menempati urutan pertama terkait jumlah kanker terbanyak di Indonesia dan menjadi salah satu penyebab kematian akibat kanker. Kurangnya selektifitas dalam mematikan sel target, menyerang sel normal, dan memberikan efek samping yang signifikan menjadi hambatan dalam pengobatan kanker. Daun jambu tangkalak (*Bellucia pentamera* Naudin.) merupakan salah satu tumbuhan di Indonesia yang mengandung senyawa antioksidan dan antikanker sehingga dapat dijadikan kandidat pengobatan kanker payudara. Penelitian ini bertujuan mengidentifikasi senyawa kimia yang terkandung di dalam ekstrak daun jambu tangkalak, menganalisis aktivitas senyawa bioaktif antikanker payudara terhadap protein p53 mutan dan aromatase secara *in-silico*, dan menentukan aktivitas antikanker payudara ekstrak daun jambu tangkalak terhadap *cell line* T47D secara *in-vitro*. Ekstrak daun jambu tangkalak diperoleh melalui proses maserasi dengan etanol. Karakterisasi senyawa kimia di dalam ekstrak daun jambu tangkalak dilakukan dengan *Liquid Chromatography-Mass Spectra* (LC-MS), diperoleh 20 senyawa kimia dengan 8 senyawa utama yaitu Cuscohygrin (16,84%), 6-methylquinolin (15,12%), Asam 3alfa-O-trans-feruloil-2alfa-hidroksi-12-ursenat-28-oat (8,43%), Pseudomonine (7,62%), Montecristin (7,42%), Taxifolin (6,85%), Asam 3-O-trans-feruloileuskafat (5,63%), dan Lupeol (5,62%). Studi *in-silico* menunjukkan bahwa senyawa taxifolin dan cucurbitacin B dari ekstrak daun jambu tangkalak (*Bellucia pentamera* Naudin) memiliki kemampuan berikatan yang kuat terhadap protein target. Taxifolin berikatan dengan protein p53 mutan dengan nilai *docking score* sebesar -6,6879 kcal/mol, mendekati nilai *native ligand* (-6,7796 kcal/mol), serta membentuk interaksi hidrofobik yang stabil, sehingga berpotensi sebagai reaktivator p53 mutan. Sementara itu, cucurbitacin B menunjukkan afinitas ikatan yang lebih tinggi (*docking score* -10,2875 kcal/mol) terhadap enzim aromatase dibandingkan dengan *native ligand* (*docking score* -7,7042 kcal/mol), yang mengindikasikan potensinya sebagai inhibitor aromatase. Sementara itu, melalui pengujian sitotoksitas dengan metode MTT assay diperoleh bahwa ekstrak daun jambu tangkalak (*Bellucia pentamera* Naudin.) memiliki nilai IC₅₀ 189,67 µg/mL terhadap *cell line* T47D (lini sel kanker payudara) dan termasuk kategori sitotoksitas sedang.

Kata Kunci: Kanker payudara, *Bellucia pentamera* Naudin, Aromatase inhibitor, Protein p53, *Molecular Docking*, MTT assay

ABSTRACT

POTENSI EKSTRAK DAUN JAMBU TANGKALAK (*Bellucia pentamera* Naudin.) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA TERHADAP CELL LINE T47D STUDI : *IN-SILICO* DAN *IN-VITRO*

By:

Sona Ayu Pratiwi (2110411019)

Prof. Dr. Adlis Santoni, MS* ; Dr. Rita Maliza*

**Supervisor*

Breast cancer ranks first in terms of the highest number of cancer cases in Indonesia and is one of the leading causes of cancer-related deaths. The lack of selectivity in killing target cells, attacking normal cells, and causing significant side effects are obstacles in cancer treatment. The leaves of the jambu tangkalak plant (*Bellucia pentamera* Naudin.) are one of the plants in Indonesia that contain antioxidant and anticancer compounds, making them a potential candidate for breast cancer treatment. This study aims to extract and identify the chemical compounds contained in jambu tangkalak leaf extract, analyze the anti-cancer activity of bioactive compounds against mutant p53 protein and aromatase *in silico*, and determine the anti-cancer activity of jambu tangkalak leaf extract against the T47D cell line *in vitro*. The jambu tangkalak leaf extract was obtained through a maceration process using ethanol. The chemical compounds in the tangkalak guava leaf extract were characterized using Liquid Chromatography-Mass Spectrometry (LC-MS), yielding 20 chemical compounds with 8 major compounds: Cuscohygrin (16.84%), 6-methylquinoline (15.12%), 3 α -O-trans-feruloyl-2 α -hydroxy-12-ursenate-28-oat acid (8.43%), Pseudomonine (7.62%), Montecristin (7.42%), Taxifolin (6.85%), 3-O-trans-feruloyl-eucalyptus acid (5.63%), and Lupeol (5.62%). *In-silico* studies indicate that the compounds taxifolin and cucurbitacin B from the leaf extract of *Bellucia pentamera* Naudin exhibit strong binding affinity toward target proteins. Taxifolin binds to mutant p53 protein with a docking score of -6.6879 kcal/mol, close to the native ligand value (-6.7796 kcal/mol), and forms stable hydrophobic interactions, thereby potentially acting as a reactivator of mutant p53. Meanwhile, cucurbitacin B showed higher binding affinity (docking score -10.2875 kcal/mol) toward the aromatase enzyme compared to the native ligand (docking score -7.7042 kcal/mol), indicating its potential as an aromatase inhibitor. Additionally, through cytotoxicity testing using the MTT assay method, it was found that the leaf extract of *Bellucia pentamera* Naudin. has an IC₅₀ value of 189.67 μ g/mL against the T47D cell line (breast cancer cell line) and falls into the category of moderate cytotoxicity.

Keywords: Breast cancer, *Bellucia pentamera* Naudin, Aromatase inhibitor, Protein p53, Molecular Docking, MTT assay