

**ISOLASI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER DARI DAUN JAMBU
AIR (*Syzygium aqueum*) DAN UJI ANTIKANKER SECARA *IN SILICO***

Farid Algani

NIM. 2320412003



**PROGRAM MAGISTER
DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2025**

Isolasi Senyawa Metabolit Sekunder dari Daun Jambu Air (*Syzygium aqueum*) dan Uji Antikanker Secara *In Silico*

Oleh : Farid Algani (2320412003)

(Di bawah bimbingan : Prof. Dr. Afrizal dan Prof. Dr. Mai Efdi)

Abstrak

Jambu air (*Syzygium aqueum*) merupakan tumbuhan yang dimanfaatkan secara tradisional sebagai obat dan diketahui memiliki berbagai aktivitas farmakologis. Penelitian ini bertujuan untuk mengisolasi senyawa metabolit sekunder dari daun jambu air serta mengevaluasi potensinya sebagai agen antikanker melalui pendekatan *in silico*. Ekstraksi dilakukan dengan metode maserasi menggunakan pelarut metanol, dilanjutkan fraksinasi bertingkat menggunakan heksana dan etil asetat. Isolasi senyawa dilakukan melalui kromatografi kolom, sedangkan karakterisasi struktur dilakukan menggunakan spektroskopi UV-Vis, FTIR, dan NMR. Hasil isolasi diperoleh dua senyawa, yaitu 2',4'-dihidroksi-6'-metoksi-3',5'-dimetilkalkon (DMC) dan lupeol. Evaluasi potensi antikanker dilakukan terhadap senyawa DMC menggunakan simulasi molecular docking pada protein Epidermal Growth Factor Receptor (EGFR) wild type dan beberapa varian mutasi (PDB ID: 1M17, 5D41, 5UG8, 5UG9, dan 6LUD). Hasil simulasi menunjukkan nilai afinitas pengikatan DMC berkisar antara $-7,1$ hingga $-7,8$ kkal/mol dengan nilai RMSD 0,543–0,992 Å, yang mengindikasikan kestabilan interaksi ligan–reseptor. Interaksi yang terbentuk melibatkan residu-residu penting pada situs aktif EGFR, termasuk residu kunci pada kantong pengikat ATP. Berdasarkan hasil tersebut, senyawa 2',4'-dihidroksi-6'-metoksi-3',5'-dimetilkalkon berpotensi untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat agen antikanker yang menargetkan EGFR, khususnya pada kanker paru-paru.

Kata Kunci : Isolasi, *molecular docking*, antikanker, 2',4'-dihydroxy-6'-methoxy-3',5'-dimethylchalcone.