

Isolasi dan Identifikasi Senyawa Metabolit Sekunder dari Daun Pelawan (*Tristaniopsis merguensis*) Sebagai Antioksidan dan Sitotoksik Terhadap Sel MCF-7

Boima Situmeang

22/501869/SPA/00873

Abstrak

Tumbuhan pelawan (*Tristaniopsis merguensis*) merupakan salah satu spesies dalam famili *Myrtaceae* yang banyak tumbuh di pulau Bangka tepatnya di Desa Namang, Kabupaten Bangka Tengah. Informasi mengenai studi struktur senyawa metabolit sekunder dari tumbuhan pelawan masih sangat terbatas. Tujuan penelitian ini adalah mengisolasi dan mengidentifikasi senyawa metabolit sekunder dari daun pelawan sebagai antioksidan dan sitotoksik terhadap sel kanker payudara MCF-7.

Tahapan penelitian meliputi pengambilan dan preparasi sampel, ekstraksi dan fraksinasi, pengujian aktivitas antioksidan, uji sitotoksik terhadap sel MCF-7, isolasi fraksi aktif, uji aktivitas antioksidan dan sitotoksik subfraksi, pemisahan dan pemurnian subfraksi aktif, *profiling* senyawa metabolit sekunder subfraksi aktif, karakterisasi senyawa metabolit sekunder, dan studi penambatan molekul senyawa metabolit sekunder terhadap protein sel kanker payudara HER-2. Fraksi etil asetat daun pelawan (EPF) memiliki aktivitas sitotoksik paling tinggi dengan nilai IC_{50} sebesar 25,85 ppm yang tergolong dalam kategori kuat. Fraksi etil asetat memiliki aktivitas antioksidan yang diuji dengan metode DPPH dan ABTS sebesar IC_{50} 43,386 $\pm$ 2,090 dan 54,741 $\pm$ 0,08 ppm dan masuk dalam kategori kuat.

Fraksinasi lebih lanjut menghasilkan subfraksi PE.05 yang memiliki nilai aktivitas antioksidan dan sitotoksik paling tinggi dengan nilai IC_{50} terhadap DPPH dan ABTS berturut-turut sebesar 40,252 $\pm$ 0,032 dan 64,830 $\pm$ 2,803 ppm. PE.05 juga memiliki aktivitas sitotoksik paling tinggi dengan nilai IC_{50} sebesar 10,66 ppm. Pemurnian fraksi aktif PE,05 menghasilkan tiga isolat dengan kode PE.05.06.23 (isolat 1), kode PE.05.10.90.70 (isolat 2), kode PE.05.10.90.81 (isolat 3). Hasil uji aktivitas antioksidan dengan DPPH dan ABTS menunjukkan bahwa isolat 1 memiliki aktivitas paling tinggi dengan nilai IC_{50} sebesar 12,1563 $\pm$ 0,1794 dan 14,5827 $\pm$ 0,4208 ppm dengan nilai IC_{50} aktivitas sitotoksik terhadap sel MCF-7 sebesar 53,85 ppm yang masuk dalam kategori aktivitas kuat. Hasil karakterisasi ketiga isolat menunjukkan bahwa isolat 1 merupakan senyawa kuersetin-3-*o*-rutinosida, isolat 2 merupakan senyawa asam betulinat, isolat 3 merupakan senyawa asam oleanolat. Hasil analisis penambatan molekul terhadap protein HER-2, isolat 1 memiliki nilai energi ikat paling rendah, yaitu sebesar -7,84 kkal/mol disusul isolat 2 dengan nilai energi ikat -7,77 kkal/mol dan isolat 3 dengan nilai energi ikat -7,74 kkal/mol.

Kata kunci: Antioksidan, HER, Pelawan, *Tristaniopsis merguensis*, Sitotoksik

Isolation and Identification of Secondary Metabolites from Pelawan (*Tristaniopsis merguensis*) Leaves for Antioxidant and Cytotoxic Against MCF-7 Cell Lines

Boima Situmeang

22/501869/SPA/00873

ABSTRACT

The pelawan plant (*Tristaniopsis merguensis*) is a species belonging to the *Myrtaceae* family. It is widely found on Bangka Island, particularly in Namang Village, Central Bangka Regency. However, the existing body of knowledge concerning the structural studies of secondary metabolites from this plant is extremely limited. The objective of this study was to isolation and identification secondary metabolites from pelawan leaves.

The research stages included the following: collection and preparation of samples, extraction and fractionation, antioxidant activity assays using DPPH and ABTS methods, cytotoxic assay using the resazurin method, isolation of the active fraction, antioxidant and cytotoxic activity assays of the subfractions, separation and purification of active subfractions, profiling, characterization of secondary metabolites, and molecular docking studies of secondary metabolites against the HER-2 breast cancer protein.

The ethyl acetate fraction of pelawan leaves (EPF) exhibited the highest cytotoxic activity. The ethyl acetate fraction also showed strong antioxidant activity, with IC_{50} values of 43.386 ± 2.090 ppm (DPPH) and 54.741 ± 0.08 ppm (ABTS). Further fractionation yielded subfraction PE.05, which demonstrated the highest antioxidant and cytotoxic activities, with IC_{50} values of 40.252 ± 0.032 ppm (DPPH) and 64.830 ± 2.803 ppm (ABTS), respectively. PE.05 also showed the strongest cytotoxic activity with an IC_{50} value of 10.66 ppm. Purification of the active fraction PE.05 resulted in three isolats, coded as PE.05.06.23 (isolate 1), PE.05.10.90.70 (isolate 2), and PE.05.10.90.81 (isolate 3).

Antioxidant activity assays using DPPH and ABTS revealed that Isolat 1 had the highest activity, with IC_{50} values of 12.1563 ± 0.1794 ppm (DPPH) and 14.5827 ± 0.4208 ppm (ABTS). The cytotoxic assay of Isolat 1 against MCF-7 cells showed an IC_{50} value of 53.85 ppm, categorized as strong activity. Based on characterization using UV-Vis, FTIR, 1H -NMR, ^{13}C -NMR, DEPT 135°, and HMBC, combined with literature comparison, isolate 1 was identified as quercetin-3-O-rutinosida, isolate 2 as betulinic acid, and isolate 3 as oleanolic acid.

Molecular docking analysis against the HER-2 protein showed that isolate 1 exhibited the lowest binding energy (-7.84 kcal/mol), followed by isolate 2 (-7.77 kcal/mol) and isolat 3 (-7.74 kcal/mol).

Keywords: Antioxidant, Cytotoxic, HER-2, Pelawan, *Tristaniopsis merguensis*