

LITERATUR RIVIEW: STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM KULIT BUAH MANGGIS (*Garcinia mangostana L.*) SEBAGAI ANTI KANKER PAYUDARA

Saeful Amin¹, Neng Sarah Nurhanifah^{2*}, Isfahani Maulidah Putri³, Rd Dina Siti Murdina⁴,
Fikri Efad Irfandi⁵, Fajar Sahrisyawal⁶.

^{1,2,3,4,5,6} Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada
nsarah01@gmail.com

Abstrak

Kanker payudara merupakan salah satu jenis kanker dengan prevalensi tertinggi di dunia dan menjadi penyebab utama kematian pada wanita. Oleh karena itu, pencarian agen antikanker dari bahan alam menjadi alternatif yang menjanjikan. Salah satu tanaman yang memiliki potensi sebagai agen antikanker adalah kulit buah manggis (*Garcinia mangostana L.*). Kulit buah manggis diketahui mengandung senyawa aktif golongan *xanton* yang memiliki aktivitas antioksidan, antitumor, dan antikanker yang sangat kuat. Tujuan penelitian ini dapat memberikan pemahaman yang lebih dalam mengenai efektivitas senyawa *xanton* dalam menghambat perkembangan sel kanker payudara, sekaligus mendorong penelitian lanjutan yang dapat mengarah pada pengembangan obat berbasis bahan alam yang lebih aman dan efisien. Metode dengan studi literatur yang bertujuan untuk mengkaji potensi senyawa *xanton* dalam kulit buah manggis sebagai agen antikanker payudara melalui pendekatan *in silico*. Metode *in silico* merupakan pendekatan komputasi yang digunakan untuk memprediksi interaksi antara senyawa dengan target protein kanker, sehingga dapat digunakan sebagai skrining awal dalam penemuan obat. Hasil studi literatur menunjukkan bahwa beberapa senyawa *xanton* seperti α -mangostin, γ -mangostin, dan garcinone E memiliki afinitas kuat terhadap protein yang berperan dalam pertumbuhan sel kanker payudara. Senyawa-senyawa tersebut menunjukkan potensi untuk menghambat proliferasi sel kanker melalui berbagai mekanisme seperti induksi apoptosis dan penghambatan enzim tertentu.

Kata Kunci: *In silico*, Kulit buah manggis, Senyawa *xanton*.

Abstract

Breast cancer is one of the most prevalent types of cancer in the world and is the leading cause of death in women. Therefore, the search for anticancer agents from natural ingredients is a promising alternative. One of the plants that has the potential as an anticancer agent is mangosteen rind (*Garcinia mangostana L.*). Mangosteen rind is known to contain active compounds of the xanthone group which have very strong antioxidant, antitumor, and anticancer activities. The purpose of this study is to provide a deeper understanding of the effectiveness of xanthone compounds in inhibiting the development of breast cancer cells, as well as encouraging further research that can lead to the development of safer and more efficient natural-based drugs. The method with a literature study aims to examine the potential of xanthone compounds in mangosteen rind as an anticancer agent for breast cancer through an *in silico* approach. The *in silico* method is a computational approach used to predict the interaction between compounds and cancer protein targets, so that it can be used as an initial screening in drug discovery. The results of literature studies show that several xanthone compounds such as α -mangostin, γ -mangostin, and garcinone E have strong affinity for proteins that play a role in the growth of breast cancer cells. These compounds show the potential to inhibit cancer cell proliferation through various mechanisms such as apoptosis induction and inhibition of certain enzymes.

Keywords: *In silico*, Mangosteen peel, Xanthone compounds

@Jurnal Ners Prodi Sarjana Keperawatan & Profesi Ners FIK UP 2025

* Corresponding author : Neng Sarah Nurhanifah

Address : Jl. Letjen Mashudi No.20, Setiaratu, Kec. Cibeureum, Kab. Tasikmalaya, Jawa Barat 46196

Email : nsarah01@gmail.com

Phone : 085724302851

PENDAHULUAN

Dalam beberapa dekade terakhir, angka kejadian penyakit kanker menunjukkan tren peningkatan yang signifikan di berbagai belahan dunia, termasuk Indonesia. Kanker tidak lagi hanya menyerang kelompok usia tua, melainkan juga mulai ditemukan pada usia produktif, bahkan remaja. Perubahan gaya hidup, pola makan tidak sehat, paparan zat karsinogen, serta stres menjadi faktor yang turut berperan dalam meningkatnya prevalensi kanker. Hal ini menyebabkan kanker menjadi masalah kesehatan masyarakat global yang memerlukan perhatian serius, tidak hanya dari segi pengobatan, tetapi juga dari aspek pencegahan dan penanganan dini (Amin et al., 2023).

Menurut (Amin et al., 2023) Kanker payudara merupakan salah satu jenis kanker yang paling banyak menyerang perempuan di seluruh dunia dan menjadi penyebab utama kematian akibat kanker pada wanita. Penyakit ini sangat kompleks karena dipengaruhi oleh berbagai faktor seperti genetik, hormonal, dan lingkungan. Gejala awal sering kali tidak disadari, sehingga banyak kasus yang baru terdiagnosis pada stadium lanjut. Hal ini tentu memperkecil peluang keberhasilan terapi dan meningkatkan risiko komplikasi. Oleh karena itu, pengembangan terapi yang efektif, efisien, dan memiliki efek samping yang rendah menjadi kebutuhan mendesak dalam upaya menangani kanker payudara secara lebih optimal. Penelitian dalam bidang farmasi dan bioteknologi telah berkembang pesat, khususnya dalam menemukan kandidat obat baru yang lebih selektif terhadap sel kanker. Salah satu pendekatan yang banyak digunakan adalah eksplorasi senyawa aktif dari tumbuhan obat yang memiliki potensi sebagai agen antikanker. Tumbuhan telah lama dikenal sebagai sumber utama pengobatan tradisional, dan kini menjadi pusat perhatian dalam riset modern. Senyawa fitokimia seperti *flavonoid*, *alkaloid*, dan *xanton* telah menunjukkan beragam aktivitas farmakologis, termasuk aktivitas sitotoksik terhadap sel kanker (Prasetiawati et al., 2019) . Potensi ini menjadikan bahan alam sebagai alternatif atau pelengkap dari terapi kanker konvensional yang ada saat ini.

Menurut (Elaine dkk., 2023) Kanker merupakan salah satu penyebab utama kematian di dunia yang ditandai oleh pertumbuhan sel yang tidak normal dan tidak terkendali. Salah satu jenis kanker yang paling umum dan menjadi perhatian global saat ini adalah kanker payudara, dengan jutaan kasus baru terdiagnosis setiap tahunnya. Penanganan kanker payudara umumnya melibatkan kemoterapi, radioterapi, dan pembedahan. Kombinasi obat kemoterapi seperti *Cyclophosphamide*, *Tamoxifen*, dan *Trastuzumab* telah menjadi standar pengobatan lini pertama. Namun, penggunaan jangka panjang dari obat-obatan ini seringkali menimbulkan efek samping

serius seperti mual, sakit kepala, kerontokan rambut, serta penurunan gairah seksual. Dalam beberapa tahun terakhir, pendekatan berbasis bahan alam mulai menarik perhatian sebagai alternatif yang lebih aman dalam terapi kanker. Salah satu bahan alam yang menunjukkan potensi tinggi sebagai agen antikanker adalah kulit buah manggis (*Garcinia mangostana L.*) (Akbar et al., 2025). Kulit buah ini dikenal mengandung senyawa aktif dari golongan *xanton*, yang memiliki aktivitas antioksidan, antibakteri, antitumor, dan antikanker. Aktivitas antioksidan dari *xanton* bahkan dilaporkan melebihi vitamin E dan C, yang dikenal sebagai antioksidan kuat. Sejauh ini, telah diidentifikasi sebanyak 31 jenis senyawa *xanton* dalam kulit buah manggis yang memiliki potensi terapeutik untuk pengembangan obat antikanker, khususnya kanker payudara (Idawati et al., 2019)

Seiring dengan kemajuan teknologi dalam bidang bioinformatika, pendekatan *in silico* menjadi salah satu metode penting dalam penelitian obat. Metode ini memungkinkan peneliti untuk melakukan skrining awal terhadap potensi aktivitas biologis suatu senyawa secara komputasional sebelum dilakukan uji laboratorium. Studi *in silico* dapat menghemat waktu dan biaya dalam proses penemuan obat, serta memberikan gambaran awal mengenai mekanisme interaksi senyawa dengan target protein kanker (Sasongko et al., 2025). Hal ini membuka peluang untuk mengeksplorasi senyawa-senyawa alami seperti *xanton* dalam kulit manggis sebagai kandidat terapi kanker yang efektif. Dengan demikian, penelitian ini bertujuan untuk mengkaji potensi senyawa-senyawa dalam kulit buah manggis melalui pendekatan *in silico* sebagai agen antikanker payudara. Tinjauan literatur ini diharapkan dapat memberikan pemahaman yang lebih dalam mengenai efektivitas senyawa *xanton* dalam menghambat perkembangan sel kanker payudara, sekaligus mendorong penelitian lanjutan yang dapat mengarah pada pengembangan obat berbasis bahan alam yang lebih aman dan efisien.

METODE

Penelitian ini menggunakan metode studi literatur review dengan pendekatan *in silico* untuk mengevaluasi potensi senyawa *xanton* yang terkandung dalam kulit buah manggis (*Garcinia mangostana L.*) sebagai agen antikanker payudara. Data dikumpulkan dari berbagai sumber ilmiah terpercaya seperti jurnal nasional dan internasional, artikel penelitian terdahulu, serta basis data publik yang memuat informasi terkait struktur kimia, aktivitas biologis, dan interaksi molekuler senyawa *xanton*. Senyawa utama yang menjadi fokus adalah *α-mangostin*, *γ-mangostin*, dan *garcinone E*. Studi ini juga meninjau hasil analisis molecular docking dari berbagai penelitian sebelumnya untuk melihat afinitas senyawa terhadap protein target kanker payudara seperti *HER2*, *Estrogen Receptor (ER)*, dan enzim *aromatase*. Selain itu, parameter

farmakokinetik dan toksisitas senyawa juga dipertimbangkan untuk menilai kelayakan pengembangan senyawa sebagai kandidat obat. Pendekatan *in silico* dalam penelitian ini dipilih karena efisiensinya dalam menyaring senyawa aktif sebelum dilakukan uji laboratorium lebih lanjut seperti *in vitro* dan *in vivo*.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Identifikasi senyawa *xanton* utama dalam kulit buah manggis dan struktur kimianya

Kulit buah manggis (*Garcinia mangostana* L.) diketahui merupakan sumber alami yang kaya akan senyawa bioaktif, terutama dari golongan *xanton*. *Xanton* adalah senyawa fenolik yang memiliki kerangka dasar terdiri dari tiga cincin aromatik yang saling terhubung, dan strukturnya dapat dimodifikasi oleh gugus metil, hidroksil, atau isoprenil pada posisi tertentu (Rahayu, 2021). Modifikasi inilah yang memberikan sifat biologis spesifik terhadap masing-masing turunan *xanton*. Dalam kulit buah manggis, telah diidentifikasi lebih dari 30 jenis senyawa *xanton*, namun beberapa senyawa menonjol karena memiliki aktivitas biologis yang kuat, termasuk α -*mangostin*, γ -*mangostin*, *mangostanol*, *garcinone E*, dan *gartanin* (Pakpahan, 2017).

Menurut Maftucha et al., (2022) α -Mangostin merupakan senyawa *xanton* paling dominan dan paling banyak diteliti. Struktur kimianya ditandai dengan adanya gugus hidroksil pada posisi 1, 3, dan 6 serta gugus isoprenil pada posisi 2 dan 8 dari kerangka *xanton*. Gugus-gugus ini berperan dalam meningkatkan kelarutan serta kemampuan senyawa ini untuk berikatan dengan target biologis di dalam tubuh. γ -Mangostin, yang memiliki struktur mirip dengan α -mangostin, memiliki satu gugus hidroksil tambahan yang berkontribusi terhadap aktivitas biologisnya yang berbeda. Perbedaan kecil dalam struktur kimia ini dapat memberikan dampak signifikan terhadap kemampuan antikanker masing-masing senyawa (Agus et al., 2023).

Selain dua senyawa utama tersebut, *garcinone E* juga menunjukkan struktur yang menarik dengan adanya gugus karbonil yang memberikan potensi aktivitas antitumor melalui mekanisme yang berbeda. Struktur unik senyawa ini menjadikannya sebagai kandidat potensial dalam pengembangan obat antikanker alami. *Gartanin* dan *mangostanol*, walaupun lebih jarang dikaji, juga menunjukkan konfigurasi struktur kimia khas dengan gugus substituen yang mampu meningkatkan afinitas terhadap protein target di dalam sel kanker (Arna dkk., 2025).

Keberadaan berbagai gugus fungsi seperti hidroksil, metoksil, dan isoprenil pada kerangka *xanton* secara langsung mempengaruhi polaritas, aktivitas biologis, dan kemampuan senyawa untuk berinteraksi dengan protein dalam sel kanker. Hal ini menjadi alasan mengapa senyawa-senyawa dari

kulit manggis menarik untuk dipelajari lebih lanjut. Selain itu, struktur kimia yang relatif stabil dan mudah dimodifikasi juga membuka peluang untuk sintesis turunan senyawa *xanton* dengan aktivitas yang lebih kuat dan selektif.

Menurut (Siswandono, 2020) Senyawa *xanton* dalam kulit manggis merupakan kelompok senyawa fenolik yang sangat potensial sebagai agen farmakologis. Struktur kimianya yang khas, serta kemampuan untuk dimodifikasi secara sintetik, menjadikannya subjek utama dalam penelitian senyawa bioaktif dari bahan alam. Potensi ini menjadi dasar kuat untuk melanjutkan eksplorasi lebih jauh melalui pendekatan *in silico* guna memahami interaksinya dengan target spesifik pada kanker payudara.

Aktivitas antikanker senyawa *xanton* terhadap sel kanker payudara berdasarkan studi *in silico*

Menurut Elaine et al., (2023) pendekatan *in silico* menjadi salah satu metode penting dalam mengevaluasi aktivitas biologis senyawa alami terhadap target molekuler penyakit, termasuk kanker. Dalam konteks kanker payudara, senyawa *xanton* dari kulit manggis telah dianalisis menggunakan simulasi *molecular docking* untuk memprediksi kemampuan mereka berinteraksi dengan protein target seperti HER2, *Estrogen Receptor* (ER), dan enzim aromatase. Hasil dari berbagai simulasi menunjukkan bahwa α -*mangostin* memiliki kemampuan afinitas yang tinggi terhadap HER2, yang merupakan salah satu reseptor penting yang berperan dalam proliferasi sel kanker payudara tipe HER2-positif.

α -Mangostin menunjukkan ikatan yang kuat dengan kantong aktif protein target, yang ditandai dengan energi ikatan yang rendah dalam simulasi docking (Maftucha dkk., 2022). Energi ikatan yang rendah ini menunjukkan stabilitas interaksi yang tinggi, sehingga α -*mangostin* berpotensi menghambat aktivitas protein tersebut. Penghambatan ini dapat mengganggu sinyal proliferasi dan pertumbuhan sel kanker, yang kemudian dapat memicu kematian sel secara terprogram atau apoptosis. Tidak hanya itu, α -*mangostin* juga mampu berinteraksi dengan enzim aromatase yang berperan dalam sintesis estrogen, sehingga relevan untuk terapi kanker payudara yang sensitif terhadap hormon.

γ -Mangostin dan *garcinone E* juga menunjukkan hasil *docking* yang menjanjikan. γ -Mangostin mampu berinteraksi secara efektif dengan *estrogen receptor alpha*, yang banyak ditemukan pada kanker payudara tipe ER-positif (Pakpahan, 2017). Interaksi ini dapat menghambat pengikatan estrogen alami ke reseptornya dan dengan demikian memutus sinyal pertumbuhan sel kanker. Sementara itu, *garcinone E* menunjukkan potensi untuk menghambat enzim *topoisomerase*, yang berperan dalam proses replikasi DNA, sehingga dapat menghambat proliferasi sel kanker secara langsung.

Selain afinitas terhadap protein target, senyawa-senyawa ini juga dievaluasi berdasarkan parameter farmakokinetik seperti kelarutan, penyerapan, dan potensi toksisitas menggunakan simulasi *in silico* tambahan seperti ADMET prediction (Setyawati et al., 2022). Hasilnya menunjukkan bahwa senyawa *xanton*, khususnya α -*mangostin*, memiliki profil toksisitas yang relatif rendah serta nilai bioavailabilitas yang baik. Ini menunjukkan bahwa senyawa tersebut tidak hanya aktif secara biologis tetapi juga memiliki potensi untuk digunakan sebagai obat oral dengan risiko efek samping yang minim (Trisnaputri et al., 2023)

Melalui pendekatan *in silico*, terbukti bahwa senyawa *xanton* dari kulit buah manggis memiliki kemampuan untuk menghambat target-target molekuler yang terlibat dalam patogenesis kanker payudara. Pendekatan ini mempercepat proses skrining awal dalam pengembangan obat, serta memberikan landasan kuat untuk melanjutkan ke tahap uji biologis lebih lanjut. Dengan potensi yang tinggi, efisiensi pemrosesan, dan keamanan yang menjanjikan, senyawa *xanton* sangat layak untuk dijadikan kandidat terapi kanker payudara berbasis bahan alam.

Interaksi molekul *xanton* dengan target protein kanker payudara seperti HER2 dan ER

Senyawa *xanton* dari kulit buah manggis menunjukkan kemampuan berinteraksi dengan berbagai target protein penting yang terlibat dalam perkembangan kanker payudara, seperti HER2 (*Human Epidermal Growth Factor Receptor 2*) dan ER (*Estrogen Receptor*) (Idawati dkk., 2019). Menurut Arna dkk. (2025) HER2 adalah protein yang berperan dalam pengaturan pertumbuhan sel, dan pada kanker payudara tipe HER2-positif, ekspresi protein ini meningkat secara signifikan, menyebabkan proliferasi sel yang tidak terkendali (Luciana et al., 2024). Melalui pendekatan *in silico*, beberapa senyawa *xanton*, terutama α -*mangostin* dan garcinone E, menunjukkan afinitas ikatan yang kuat terhadap situs aktif HER2, yang menandakan kemampuan untuk menghambat fungsinya.

Proses interaksi molekul antara *xanton* dan HER2 dianalisis menggunakan simulasi *molecular docking*, yang memungkinkan pemetaan posisi pengikatan senyawa dengan kantong aktif protein. Hasil dari simulasi ini menunjukkan bahwa senyawa *xanton* mampu membentuk ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik yang stabil dengan residu-residu penting dalam domain katalitik HER2 (Maftucha dkk., 2022). Interaksi ini dapat mengganggu fungsi biologis HER2, seperti pengaktifan jalur sinyal MAPK dan PI3K/AKT yang bertanggung jawab terhadap proliferasi dan kelangsungan hidup sel kanker. Oleh karena itu, penghambatan HER2 oleh senyawa *xanton* memiliki potensi besar dalam memperlambat pertumbuhan kanker payudara.

Sementara itu, senyawa *xanton* seperti γ -*mangostin* dan mangostanol menunjukkan interaksi yang signifikan dengan *Estrogen Receptor* (ER), terutama ER α yang umum ditemukan pada kanker payudara tipe ER-positif. Estrogen receptor berperan penting dalam mengatur ekspresi gen yang terkait dengan pembelahan sel. Dengan mengikat ER di tempat yang sama dengan estrogen alami, senyawa *xanton* dapat bertindak sebagai antagonis yang menghambat aktivasi reseptor tersebut. Hal ini menyebabkan gangguan dalam jalur transduksi sinyal hormon, sehingga menghambat pertumbuhan sel kanker yang tergantung pada estrogen (Amin dkk., 2023).

Penelitian Prasetiawati et al., (2018) tentang *in silico* juga menunjukkan bahwa beberapa senyawa *xanton* mampu menyebabkan perubahan konformasi pada protein target setelah berikatan, yang berpotensi mempengaruhi aktivitas enzimatik dan interaksi protein-protein dalam sel kanker. Misalnya, α -*mangostin* tidak hanya mengikat HER2, tetapi juga menyebabkan perubahan struktur sekunder protein, yang bisa menurunkan stabilitasnya (Saifudin, 2014). Efek ini dapat memperkuat mekanisme penghambatan fungsi protein target secara menyeluruh, bukan hanya melalui blokade kompetitif pada situs pengikatan ligan. Dengan kemampuan senyawa *xanton* untuk berinteraksi langsung dan spesifik dengan protein target penting dalam patogenesis kanker payudara, senyawa ini menunjukkan potensi besar untuk dikembangkan menjadi agen terapi yang menargetkan jalur molekuler spesifik. Interaksi ini memberikan efek yang lebih selektif dan berpotensi mengurangi dampak negatif terhadap sel normal, menjadikannya strategi yang lebih aman dibandingkan terapi konvensional yang bersifat non-spesifik.

Potensi pengembangan senyawa *xanton* sebagai kandidat obat alami dengan efek samping rendah

Penggunaan bahan alam sebagai sumber pengobatan kanker terus berkembang seiring meningkatnya kesadaran akan efek samping dari terapi konvensional seperti kemoterapi dan radiasi. Senyawa *xanton* yang terkandung dalam kulit buah manggis menawarkan alternatif yang menarik karena aktivitas biologisnya yang tinggi, stabilitas kimia yang baik, serta potensi toksisitas yang relatif rendah. Dalam penelitian Jupita et al., (2025), *xanton* seperti α -*mangostin* telah menunjukkan aktivitas antikanker yang kuat, namun dengan efek samping minimal terhadap sel normal. Hal ini menjadi keunggulan utama dalam pengembangan senyawa ini sebagai kandidat obat alami (Primack, 1983).

Salah satu keuntungan besar dari senyawa *xanton* adalah kemampuannya untuk bekerja secara selektif terhadap sel kanker. Selektivitas ini dapat mengurangi risiko kerusakan pada jaringan sehat, berbeda dengan kemoterapi konvensional yang bersifat sitotoksik terhadap semua jenis sel yang sedang aktif membelah. Selain itu, senyawa *xanton*

juga memiliki aktivitas antioksidan yang kuat, yang berfungsi melindungi sel sehat dari stres oksidatif dan mempercepat proses pemulihan jaringan. Aktivitas ganda sebagai antikanker dan antioksidan inilah yang menjadi nilai tambah dalam strategi pengobatan berbasis bahan alam (Trisnaputri et al., 2023).

Potensi pengembangan senyawa *xanton* juga terlihat dari kelayakan farmakokinetiknya. Studi *in silico* dan prediksi ADMET menunjukkan bahwa senyawa ini memiliki kelarutan yang cukup baik dalam pelarut biologis serta mampu diserap dengan efektif dalam sistem pencernaan. Profil toksikologisnya juga menunjukkan batas aman penggunaan yang cukup luas. Kemampuan ini penting dalam pengembangan sediaan obat, baik dalam bentuk kapsul, tablet, maupun ekstrak cair. Kombinasi efektivitas biologis, stabilitas, dan keamanan menjadikan senyawa ini sangat prospektif sebagai kandidat terapi alternatif atau bahkan sebagai suplemen pendamping terapi utama (Idawati dkk., 2019).

Selain itu, produksi dan ketersediaan bahan baku kulit manggis cukup melimpah dan mudah diperoleh, terutama di wilayah tropis seperti Indonesia. Hal ini memungkinkan pengembangan industri berbasis bahan alam lokal yang berkelanjutan dan terjangkau. Dengan pengolahan yang tepat, senyawa *xanton* dapat diekstraksi dan dimurnikan untuk menghasilkan produk yang memenuhi standar farmasi. Ketersediaan bahan baku ini juga mendukung produksi dalam skala besar jika suatu saat senyawa ini berhasil lolos uji klinis dan masuk ke pasar obat herbal atau obat modern berbasis alam (Siswandono, 2016).

Secara keseluruhan, senyawa *xanton* memiliki potensi besar untuk dikembangkan menjadi obat alami dengan efek samping rendah yang dapat digunakan secara mandiri maupun sebagai terapi pendamping dalam pengobatan kanker payudara. Kombinasi antara aktivitas antikanker yang kuat, selektivitas terhadap sel kanker, profil toksikologi yang aman, serta ketersediaan bahan baku yang tinggi menjadikan senyawa ini sebagai salah satu kandidat paling menjanjikan dalam pencarian terapi kanker berbasis alam. Ke depan, penelitian lanjutan dalam bentuk uji *in vitro*, *in vivo*, dan uji klinis akan menjadi langkah penting untuk mewujudkan potensi besar ini menjadi solusi nyata bagi pasien kanker.

SIMPULAN

Berdasarkan hasil telaah literatur, senyawa *xanton* yang terdapat dalam kulit buah manggis, terutama *α-mangostin*, *γ-mangostin*, dan garcinone E, menunjukkan potensi kuat sebagai agen antikanker payudara melalui mekanisme penghambatan pertumbuhan sel kanker, induksi apoptosis, dan pengikatan terhadap protein target

seperti HER2 dan ER. Metode *in silico* memberikan gambaran awal yang sangat berguna mengenai interaksi molekuler dan afinitas senyawa terhadap target biologis yang relevan dengan kanker payudara. Senyawa-senyawa tersebut juga menunjukkan profil toksisitas yang relatif rendah, sehingga berpotensi dikembangkan sebagai terapi alternatif yang lebih aman dibandingkan dengan obat-obatan kemoterapi konvensional. Meskipun demikian, diperlukan penelitian lanjutan secara *in vitro* dan *in vivo* untuk memvalidasi efektivitas dan keamanan penggunaan senyawa ini dalam konteks pengobatan kanker payudara.

DAFTAR PUSTAKA

Agus, A. S. R., Purnaningtyas, S. R. D., Sari, D. R. T., Ischak, N. I., Gianti, L., & Cahyanto, H. N. (2023). *Kimia Medisinal*. Global Eksekutif Teknologi.

Akbar, H., Najib, A., & Fawwaz, M. (2025). Chemical Profile Study and Screening in Silico of Cyclooxygenase-2 Inhibitor Chemical Compounds from Ethanol Extract Of Mangosteen Fruit Peel (Garcinia Mangostana L.). *Indonesian Research Journal on Education*, 5(1), 2271–2279.

Amin, S., Aryanti, R., & Aprilia, A. Y. (2023). Studi In Silico Senyawa yang Terkandung dalam Kulit Buah Manggis (Garcinia mangostana L.) Sebagai Antikanker Payudara. *Prosiding Seminar Nasional Diseminasi Penelitian Volume 3*, 3(1).

Arna, Y. D., Mokodongan, R. S., Jannah, F., Feriadi, E., Barung, E. N., Purba, J. S., Pratama, A. A., Astryna, S. Y., Pomalingo, D. R., Rahmi, S., Doloking, H., Maghfirah, R., Sembiring, B. M., & Dhuha, N. S. (2025). *Kimia Medisinal* (L. O. Alifariki (ed.)). Media Pustaka Indo.

Elaine, A. A., Nisa, A., Tahara, N., Aini, D. Q., & Syahriar, Z. (2023). In Silico Study of Mangosteen Fruit (Garcinia mangostana L.) as Pancreatic Anticancer Against AKT Kinase. *Indonesian Journal of Biological Pharmacy*, 3(1), 19–32.

Idawati, S., Hakim, A., & Andayani, Y. (2019). Pengaruh Metode Isolasi α-mangostin dari Kulit Buah Manggis (Garcinia mangostana L.) terhadap Rendemen α-mangostin. *Jurnal Penelitian Pendidikan IPA*, 5(2), 144.

Jupita, J., Sasongko, G. H., Hardianti, A. N., Muftiana, E., Karomah, N., & Sela, S. (2025). Analisis In Silico Senyawa Tapak Dara (Catharanthus Roseus L.) pada reseptor Checkpoint Kinase 1 Sebagai Antikanker. *Jurnal Ilmiah Farmasi Terapan & Kesehatan*, 3(1), 12–24.

Luciana, L., Billi, J., Farm, M., Febri, S., Farm, M., Faisal, H., Silviana, E., Habibah, N., Handayani, S., & Nasution, L. R. (2024).

- Bunga Rampai Kimia Medisinal*. Media Pustaka Indo.
- Maftucha, N., Manalu, R., Amelia, R., Cordia, P., & Bupu, R. (2022). Potensi Senyawa Turunan Xanton dari Kulit Buah Manggis (*Garcinia mangostana* L.) sebagai Inhibitor Protein Mycobacterium Tuberculosis: Studi in Silico. *Pharmaceutical Journal of Indonesia*, 7(2), 123–128.
- Pakpahan, N. F. (2017). *Uji Aktivitas Inhibisi Fraksi Aktif Ekstrak Kulit Buah Manggis (Garcinia mangostana L.) Terhadap Enzim Malate: Quinone Oxidoreductase (MQO) dari Plasmodium falciparum*. UIN Syarif Hidayatullah Jakarta: Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan, 2017.
- Prasetiawati, R., Permana, B., Soni, D., & Agung, S. N. (2018). Studi Penambatan Molekul Senyawa Turunan Xanton dari Kulit Buah Manggis (*Garcinia mangostana* L.) terhadap ER- $\hat{1}$ ±(Reseptor Estrogen Alfa) dan ER- $\hat{2}$ (Reseptor Estrogen Beta) sebagai Anti Kanker Payudara. *Jurnal Ilmiah Farmako Bahari*, 9(1), 45–52.
- Prasetiawati, R., Permana, B., Soni, D., & Agung, S. N. (2019). Molecular Docking Study Of Xanthone Derivative Compounds Of Mangosteen Rind (*Garcinia Mangostana* L.) To Er-A (Estrogen Receptor Alfa) And Er-B (Estrogen Receptor Beta) As Anti-Breastcancer. *Farm. Bahari*, 10(1), 45–52.
- Primack, H. . (1983). *Method of Stabilizing Polyvalent Metal Solutions* (Patent No. 4,373,104).
- Rahayu, P. (2021). *Pembuatan Ekstrak dan Formula Krim dari Kulit Buah Manggis (Garcinia 'mangostana' L.)*. UNIVERSITAS MA CHUNG.
- Saifudin, A. (2014). *Senyawa Alam Metabolit Sekunder Teori, Konsep, dan Teknik Pemurnian*. Deepublish.
- Sasongko, G. H., Hardianti, A. N., Muftiana, E., & Karomah, N. (2025). Analisis In Silico Senyawa Tapak Dara (*Catharanthus Roseus* L.) pada reseptor Checkpoint Kinase 1 Sebagai Antikanker. *Jurnal Ilmu Farmasi Terapan Dan Kesehatan*, 3(1), 12–24.
- Setyawati, N. K. A. A., Santika, I. W. M., & Yustiantara, P. S. (2022). Molecular Docking Senyawa α -mangostin sebagai Antiinflamasi secara In Silico. *Jurnal Jejaring Matematika Dan Sains*, 4(2), 41–49.
- Siswandono, E. (2016). *Kimia Medisinal 1* (Siswandono (ed.); Edisi 2). Airlangga University Press.
- Siswandono, E. (2020). *Kimia Medisinal 1 Edisi 2*. Airlangga University Press.
- Trisnaputri, D. R., Handayani, R. D., Dewi, C., & Ramadhan, D. S. F. (2023). Studi In Silico Senyawa α -Mangostin Sebagai Inhibitor Terhadap Reseptor Glikogen Sintase Kinase 3 β (Gsk 3 β) Sebagai Alternatif Terapi Kanker Payudara. *Jurnal Pharmacia Mandala Waluya*, 2(2), 63–75.