

ABSTRAK
ANALISIS BIOINFORMATIK SENYAWA AKTIF MORIN DAN
MORUSIN PADA MURBEI (*Morus alba*) SEBAGAI ANTIKANKER
PAYUDARA

Afif Hariawan Pratama¹, Sarmoko², Muhamad Salman Fareza²

Latar belakang : Kanker payudara merupakan salah satu penyebab kematian tertinggi pada wanita. Obat herbal yang dapat mempengaruhi proses induksi apoptosis dan menghambat proses angiogenesis dan proliferasi sel menjadi pengobatan yang berpotensi pada kanker payudara. Murbei (*Morus alba*) merupakan tumbuhan herbal yang memiliki senyawa aktif seperti morin dan morusin yang terbukti dapat menghambat pertumbuhan kanker. Namun masih sedikit penelitian yang melaporkan mekanisme efek morin dan morusin dalam menghambat pertumbuhan kanker payudara.

Metodologi : Penelusuran data dilakukan dengan menggunakan PubMed, STITCH, STRING, dan PDB. Data yang didapatkan dari STITCH dan STRING dibandingkan dengan gen yang berperan pada kanker payudara. Interaksi dari tiap protein dilihat dari STRING dan Cytoscape untuk melihat *top 10 hub gene*. Protein yang potensial dilakukan simulasi *docking* untuk melihat interaksi antara protein dan senyawa.

Hasil penelitian : AKT1, MAPK1, dan MAPK3 menjadi protein yang potensial untuk ditargetkan oleh morin. Simulasi *docking* memberikan hasil MAPK3 berpotensi sebagai target dari morin karena memiliki energi ikatan yang lebih rendah dari ligan natif dan neratinib dengan masing-masing energi ikatan yaitu -9; -8,3; dan -2,8 kkal/mol. Morin mengikat residu asam amino Ser170, Asn171, dan Cys183 pada sisi aktif MAPK3. EGFR, SRC, dan MAPK1 menjadi protein yang potensial untuk ditargetkan morusin. Simulasi *docking* memberikan hasil EGFR dan SRC berpotensi sebagai target dari morusin. Energi ikatan dari morusin lebih rendah dari ligan natif dan lapatinib, masing-masing energi ikatan yaitu -9,6; -7,5; dan -9,2 kkal/mol pada EGFR dan -8,2; -6,4; dan -5,3 kkal/mol pada SRC. Pada EGFR morusin berikatan pada asam amino Leu694, Val702, Leu820, Ala719, Leu768, dan Lys721 dan pada SRC morusin berikatan pada asam amino Lys295 dan Gly344 yang merupakan sisi aktif. Morin dan morusin sama-sama mengikat MAPK1 dikarenakan memiliki struktur yang mirip. Morin dan morusin mengikat asam amino Cys164, Lys52, Leu105, dan Met106, namun morusin tidak berikatan dengan Gln103.

Kesimpulan : Morin berpotensi menghambat pertumbuhan sel kanker dengan menargetkan MAPK3 dan morusin berpotensi menghambat pertumbuhan sel kanker dengan menghambat EGFR dan SRC.

Kata Kunci : kanker payudara, morin, morusin, menghambat pertumbuhan, antikanker

¹Mahasiswa Jurusan Farmasi Fakultas Ilmu-Ilmu Kesehatan Universitas Jenderal Soedirman

²Jurusan Farmasi Fakultas Ilmu-Ilmu Kesehatan Universitas Jenderal Soedirman

ABSTRACT

BIOINFORMATION ANALYSIS OF ACTIVE COMPOUNDS MORINE AND MORUSINE IN MURBEI (*Morus alba*) AS BREAST ANTICANCER

Afif Hariawan Pratama¹, Sarmoko², Muhamad Salman Fareza²

Background : Breast cancer is one of the highest causes of death in women. Herbal drugs that can affect the process of induction of apoptosis and inhibit the process of angiogenesis and cell proliferation are potential treatments for breast cancer. Mulberry (*Morus alba*) is an herbal plant that has active compounds such as morin and morusin which have been shown to inhibit cancer growth. However, there are still few studies that report the mechanism of the effect of Morin and Morusin in inhibiting the growth of breast cancer.

Methodology: Data search was performed using PubMed, STITCH, STRING, and PDB. Data obtained from STITCH and STRING were compared with genes that play a role in breast cancer. The interaction of each protein was determined from STRING and Cytoscape to see the top 10 hub genes. Morin and morusin were docking to analyze their interaction.

Research results: AKT1, MAPK1, and MAPK3 are potential proteins to be targeted by morin. Docking simulation showed that MAPK3 has the potential to be a target by morin because it has a lower binding energy than the native and neratinib ligands with each bond energy of -9; -8.3; and -2.8 kcal/mol. Morin binds to the amino acid residues Ser170, Asn171, and Cys183 on the active site of MAPK3. EGFR, SRC, and MAPK1 are potential proteins to be targeted by morusin. Docking simulation showed that EGFR and SRC were potential targets of morusin because they had lower binding energies than native and lapatinib ligands. The respective bond energies are -9.6; -7.5; and -9.2 kcal/mol at EGFR and -8.2; -6.4; and -5.3 kcal/mol. In EGFR, morusin binds to the amino acids Leu694, Val702, Leu820, Ala719, Leu768, and Lys721 and at SRC, Morusin binds to the amino acids Lys295 and Gly344 which are the active sites. Morin and morusin both bind to MAPK1 because they have a similar structure. Morin and morusin bind to the amino acids Cys164, Lys52, Leu105, and Met106, but morusin does not bind to Gln103.

Conclusion: Morin has potential inhibit cancer cell growth by targeting MAPK3 and morusin has potential inhibit cancer cell growth by inhibiting EGFR and SRC.

Keywords: breast cancer, morin, morusin, inhibiting growth, anticancer

¹Student of Pharmacy Department, Faculty of Health Sciences, Jenderal Soedirman University

²Department of Pharmacy, Faculty of Health Sciences, Jenderal Soedirman University