

ABSTRAK

ANALISIS BIOINFORMATIKA SENYAWA AKTIF PADA TANAMAN SAMBILOTO (*Andrographis paniculata*) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA

Bintang Nugrahani Sekarratri¹, Sarmoko², Nur Amalia Choironi²

Latar Belakang: Kanker payudara adalah kanker yang umum diderita wanita, namun terapi dengan obat bekerja tidak selektif. Upayanya pencarian senyawa aktif dari tanaman obat. *Andrographis paniculata* dilaporkan memiliki efek antikanker pada pensinyalan metabolik, proliferasi sel, dan apoptosis. Senyawa *A. paniculata* ditemukan secara bioinformatika memiliki efek antiinflamasi. Penelitian dilakukan secara bioinformatika mencari efek antikanker senyawa *A. paniculata*.

Tujuan Penelitian: Mengetahui target potensial molekular dan besar energi ikatan dari senyawa aktif tanaman *A. paniculata* sebagai antikanker

Metodologi: Penelusuran data menggunakan database STITCH, STRING, Swiss, dan NCBI. 644 gen dianalisis geneontology, KEGG pathway, dan drug association menggunakan webgestalt serta diolah menggunakan cytoscape, didapatkan top 10 hub gene. MAPK3 dan AKT1 dijadikan reseptor pada proses penambatan. Preparasi menggunakan Avogadro untuk memisahkan ligan natif. Validasi menggunakan pymol untuk mengetahui nilai RMSD. Penambatan menggunakan autodock untuk mengetahui energi ikatan dan biovia untuk pemvisualisasian.

Hasil Penelitian: Protein MAPK3 dan AKT1 dapat dijadikan reseptor pada proses penambatan. RMSD MAPK3 0,427Å dan AKT1 0,560Å. Senyawa 18 memiliki energi ikatan terendah. Hasil visualisasinya tidak memiliki ikatan hidrogen pada reseptor MAPK3 namun memiliki pada reseptor AKT1.

Kesimpulan: Senyawa 18 merupakan senyawa terbaik dengan energi ikatan terendah. Kedua reseptor ada pada pathway kinase.

Kata Kunci: Sambiloto, *Andrographis paniculata*, bioinformatika, penambatan molekul, antikanker payudara

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

² Dosen Jurusan Farmasi Fakultas Ilmu-Ilmu Kesehatan Universitas Jenderal Soedirman

ABSTRACT

BIOINFORMATICS ANALYSIS OF ACTIVE COMPOUND OF SAMBILOTO (*Andrographis paniculata*) PLANT AS ANTI-BREAST CANCER

Bintang Nugrahani Sekarratri¹, Sarmoko², Nur Amalia Choironi²

Background: Breast cancer is a common cancer suffered by women, but the drug treatment works non-selectively. Solution is to search for active compounds from medicinal plants. *Andrographis paniculata* is reported to have anticancer effects on metabolic signaling, cell proliferation, and apoptosis. *A. paniculata* compound was found in bioinformatics to have anti-inflammatory effect. Research was conducted using bioinformatics to look for the anticancer effect of *A. paniculata* compounds.

Objectives: To determine potential molecular targets and binding energy of compound of *A. paniculata* as anticancer.

Methodology: Data retrieval using STITCH, STRING, Swiss and NCBI databases. 644 genes were analyzed by geneontology, KEGG pathway, and drug association using webgestalt and processed using cytoscape, obtained top 10 hub genes. MAPK3 and AKT1 are used as receptors in docking. Preparation using Avogadro to separate native ligands. Validation using pymol to find RMSD value. Docking uses autodock to determine bond energy and biovia for visualization.

Results: MAPK3 and AKT1 proteins can be used as receptors in docking process. Obtained RMSD MAPK3 0.427Å and AKT1 0.560Å. Compound 18 has lowest bond energy. Visualization results no hydrogen bonds at MAPK3 receptor but at AKT1 receptor.

Conclusion: Compound 18 is the best compound with lowest bond energy. Both receptors are in kinase pathway.

Keywords: Sambiloto, *Andrographis paniculata*, bioinformatics, molecular docking, breast cancer

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

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