

ABSTRAK

ANALISIS BIOINFORMATIKA DAN MOLECULAR DOCKING SENYAWA RESVERATROL PADA KANKER PAYUDARA RESISTEN TAMOKSIFEN

Latar Belakang : Kanker payudara merupakan jenis kanker paling banyak menyerang wanita di seluruh dunia. Tamoksifen menjadi terapi lini pertama pada pasien kanker payudara *Estrogen Receptor* (ER) positif, namun 50% penerima tamoksifen mengalami resistensi sehingga diperlukan terapi untuk mengatasinya. Hasil penelitian sebelumnya menunjukkan bahwa resveratrol berpotensi sebagai agen antikanker dan agen *chemosensitizer*. Hal tersebut mendasari penelitian ini untuk mengetahui potensi resveratrol pada kanker payudara yang resisten tamoksifen.

Metodologi : Penelitian secara bioinformatika menggunakan database STITCH, STRING, NCBI dan didapatkan *Potentian Target Therapeutic Genes (PTTGs)* melalui venny 2.1. PTTGs dianalisis menggunakan webgestalt dan diolah menggunakan cytoscape sehingga didapatkan *top 10 hub gene*. Protein yang potensial ditambatkan dengan resveratrol untuk melihat interaksi resveratrol dengan protein target berdasarkan energi dan jenis ikatan melalui metode *molecular docking* menggunakan AutoDock Vina dan divisualisasikan dengan BIOVIA.

Hasil Penelitian : *Top 10 hub gene* yaitu TP53, AKT1, ESR1, JUN, CTNNB1, STAT3, SRC, HIF1A, MYC dan FOXO1. AKT1, ESR1 dan SRC berpotensi sebagai target dari resveratrol karena memiliki energi yang lebih rendah dari kontrol positif yaitu -8,2; -8,1 dan -7,4 kkal/mol serta mengikat residu asam amino pada sisi aktif masing-masing protein.

Kesimpulan : Resveratrol memiliki potensi dalam mengatasi kanker payudara yang resisten tamoksifen dengan menargetkan protein AKT1, ESR1 dan SRC.

Kata Kunci : Kanker Payudara, Resistensi Tamoksifen, Resveratrol

¹Mahasiswa Jurusan Farmasi FIKes Universitas Jenderal Soedirman

²Jurusan Farmasi FIKes Universitas Jenderal Soedirman

ABSTRACT

ANALYSIS OF BIOINFORMATICS AND MOLECULAR DOCKING OF RESVERATROL COMPOUNDS IN TAMOXIFEN-RESISTANT BREAST CANCER

Dita Novia Maharani¹, Nur Amalia Choironi², Sarmoko²

Background : Breast cancer is the most common type of cancer affecting women across the world. Tamoxifen is the first-line therapy for Estrogen Receptor (ER)-positive breast cancer patients, but 50% of tamoxifen recipients have shown resistance so that therapy is required to overcome it. According to the research results study, resveratrol has the potential as an anticancer agent and chemosensitizer agent. It underlies the research to determine the potency of resveratrol in tamoxifen-resistant breast cancer.

Methods : Bioinformatics research used the STITCH, STRING, and NCBI databases, while Venny 2.1 was used to obtain Potential Target Therapeutic Genes (PTTGs). PTTGs were then analyzed using WebGestalt and processed using Cytoscape to obtain the top 10 hub genes. Potential proteins are tethered with resveratrol to observe the interaction of resveratrol with target proteins based on their energy and type of bond through the molecular docking method using AutoDock Vina and visualized with BIOVIA.

Results : Top 10 hub genes include TP53, AKT1, ESR1, JUN, CTNNB1, STAT3, SRC, HIF1A, MYC and FOXO1. AKT1, ESR1, and SRC are potential targets for resveratrol since they have lower energy than the positive control, namely -8.2, -8.1, and -7.4 kcal/mol, respectively, and they bind to amino acid residues on the active site of each protein.

Conclusion : Resveratrol can potentially treat tamoxifen-resistant breast cancer by targeting AKT1, ESR1, and SRC proteins.

Keywords : Breast Cancer, Tamoxifen Resistance, Resveratrol

¹Student of the Pharmacy Department of Health Sciences Faculty at Jenderal Soedirman University

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