

ABSTRAK

ANALISIS BIOINFORMATIKA SENYAWA XANTHORRHIZOL SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA

Rini Dwi Puspitasari¹, Muhamad Salman Fareza², Nur Amalia Choironi²

Latar Belakang: Kanker payudara merupakan penyakit kanker ganas yang dapat menyebabkan kematian dini terutama pada wanita. Senyawa bahan alam yang dilaporkan memiliki efek antikanker payudara adalah senyawa xanthorrhizol. Senyawa xanthorrhizol memiliki aktivitas antiproliferatif yang kuat dengan menginduksi kematian sel apoptosis pada kanker payudara, tetapi belum pernah dilakukan kajian komprehensif mekanisme aksi senyawa xanthorrhizol secara bioinformatika.

Tujuan Penelitian: Mengetahui target potensial molekuler dan besar energi ikatan dari senyawa xanthorrhizol sebagai antikanker payudara.

Metodologi: Penelitian ini dilakukan secara bioinformatika dan *molecular docking*. Pencarian data IDP & ITP menggunakan Swiss Target. Hasil 61 gen PTTGs dianalisis menggunakan KEGG pathway dan *drug association* dengan menggunakan WebGestalt serta dianalisis kembali menggunakan *cytoscape* kemudian didapatkan 10 top hub gen senyawa xanthorrhizol. Kontrol positif yang digunakan pada penelitian ini adalah obat doxorubicin.

Hasil penelitian: 10 top hub gene dari senyawa xanthorrhizol yaitu SRC, ESR1, MAPK1, HSP90AA1, PTGS2, IGF1R, MAPK8, ERBB2, ESR2, dan JAK2. Protein HP90AA1, PTGS2, ERBB2, JAK2 dan SRC dilakukan analisis *molecular docking*. Nilai RMSD secara berturut-turut yaitu 0,400Å; 0,379Å; 0,977Å; 0,948Å; 0,833Å dengan energi ikatan masing-masing -6,4 kkal/mol; -7,9 kkal/mol; -8,8 kkal/mol; -7,5 kkal/mol; -8,1 kkal/mol.

Kesimpulan: Senyawa xanthorrhizol dapat menghambat pertumbuhan sel kanker payudara dengan menghambat reseptor HSP90AA1, ERBB2, JAK2 dan SRC dengan didapatkannya energi ikatan lebih rendah dibandingkan dengan kontrol positif (Doxorubicin).

Kata Kunci: Senyawa xanthorrhizol, bioinformatika, doxorubicin.

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

²Departemen Farmasi Fakultas Ilmu-Ilmu Kesehatan Universitas Jenderal Soedirman

ABSTRACT

BIOINFORMATICS ANALYSIS OF XANTHORRHIZOL COMPOUNDS AS ANTI-CANCER BREAST

Rini Dwi Puspitasari¹, Muhamad Salman Fareza², Nur Amalia Choironi²

Background: Breast cancer is a malignant cancer that can cause premature death, especially in women. Natural ingredients that are reported to have anti-breast cancer effects are xanthorrhizol compounds. Xanthorrhizol compounds have strong antiproliferative activity by inducing apoptotic cell death in breast cancer, but a comprehensive study of the mechanism of action of xanthorrhizol compounds has never been carried out bioinformatically.

Research Objectives: To determine the potential molecular targets and binding energy of xanthorrhizol compounds as anticancer of the breast.

Methodology: This research was conducted using bioinformatics and molecular docking. Search for IDP & ITP data using Swiss Target. The results of 61 PTTGs genes were analyzed using the KEGG pathway, and drug association using WebGestalt and re-analyzed using cytoscape and then obtained 10 top gene hubs of xanthorrhizol compounds. The positive control used in this study was doxorubicin.

Results: 10 top hub genes of xanthorrhizol compounds, namely SRC, ESR1, MAPK1, HSP90AA1, PTGS2, IGF1R, MAPK8, ERBB2, ESR2, and JAK2. HP90AA1, PTGS2, ERBB2, JAK2 and SRC proteins were subjected to molecular docking analysis. RMSD values are respectively 0.400Å; 0.379Å; 0.977Å; 0.948Å; 0.833Å with a bond energy of -6.4 kcal/mol each; -7.9 kcal/mol; -8.8 kcal/mol; -7.5 kcal/mol; -8.1 kcal/mol.

Conclusion: Xanthorrhizol compounds can inhibit the growth of breast cancer cells by inhibiting HSP90AA1, ERBB2, JAK2 and SRC receptors with lower binding energy compared to the positive control (Doxorubicin).

Keywords: Xanthorrhizol compounds, bioinformatics, doxorubicin.

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

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