

ABSTRAK

IVANA DESIANI, 2021, ANALISIS BIOKEMOINFORMATIKA KANDUNGAN KIMIA TANAMAN MENGGKUDU (*Morinda citrifolia* L.) TERHADAP TARGET ANTIKANKER PAYUDARA, SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. dan apt. Fitri Kurniasari, M.Farm.

Kanker payudara adalah kanker yang paling sering didiagnosis di dunia. Salah satu tanaman obat yang dapat digunakan sebagai agen kemopreventif adalah tanaman mengkudu (*Morinda citrifolia* L.). Tujuan dari penelitian ini adalah mengetahui protein yang diprediksi menjadi target molekuler, mengetahui kandungan kimia tanaman mengkudu yang diprediksi memiliki interaksi terbaik terhadap target molekuler kanker payudara, dan mengetahui prediksi parameter farmakokinetika dari senyawa tanaman mengkudu.

Identifikasi kandungan kimia menggunakan *Knapsack*. Identifikasi protein target menggunakan *SEA Search* dan *Swiss Target Prediction*. Metode penambatan molekuler menggunakan *software* YASARA 19.7.20, MarvinSketch, Vega ZZ, PLANTS 1.1, *Discovery Studio Visualizer* serta webserver PubChem dan *Protein Data Bank*. Prediksi profil farmakokinetika menggunakan ADMETLab 2.0. Hasil analisis penambatan molekuler berupa skor serta pola interaksi antara ligan uji dengan protein. Skor dan persentase kesamaan interaksi ligan dan protein dibandingkan dengan ligan asli menggunakan diagram.

Berdasarkan hasil penelitian didapatkan protein ER α dan HSP90 diprediksi menjadi target molekuler kanker payudara dari kandungan kimia tanaman mengkudu. Senyawa yang diprediksi memiliki interaksi yang terbaik terhadap protein ER α adalah daucosterol. Senyawa yang diprediksi memiliki interaksi yang terbaik terhadap protein HSP90 adalah (-)-pinoresinol, daucosterol, beta sitosterol, alizarin, nordamnacanthal, rubiadin, rubiadin 1-methyl ether, dan soranjidiol. Senyawa yang memiliki prediksi ADMET yang baik adalah (-)-pinoresinol, beta sitosterol, dan daucosterol.

Kata kunci : kanker payudara, tanaman mengkudu, *Morinda citrifolia* L., penambatan molekuler, PLANTS, ADMETLab 2.0

ABSTRACT

IVANA DESIANI, 2021, BIOCHEMOINFORMATICS ANALYSIS OF THE CHEMICAL CONTENT OF NONI PLANTS (*Morinda citrifolia* L.) AGAINST BREAST CANCER ANTICANCER TARGETS, THESIS, BACHELOR OF PHARMACY, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA. Supervised by Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. and apt. Fitri Kurniasari, M.Farm.

Breast cancer is the most frequently diagnosed cancer in the world. One of the medicinal plants that can be used as a chemopreventive agent is the noni plant (*Morinda citrifolia* L.). The purpose of this study was to determine the protein that is predicted to be a molecular target, to determine the chemical content of the noni plant which is predicted to have the best interaction with the molecular target of breast cancer, and to determine the prediction of the pharmacokinetic parameters of noni plant compounds.

Identification of chemical content using Knapsack. Identification of target proteins using SEA Search and Swiss Target Prediction. Molecular anchoring method using YASARA 19.7.20, MarvinSketch, Vega ZZ, PLANTS 1.1 software, Discovery Studio Visualizer and PubChem webservice and Protein Data Bank. Prediction of pharmacokinetic profile using ADMETlab 2.0. The results of the molecular anchoring analysis were in the form of scores and patterns of interaction between the test ligands and proteins. Scores and percentages of similarity of ligand and protein interactions compared with native ligands using diagrams.

Based on the results of the study, it was found that ER α and HSP90 proteins were predicted to be molecular targets of breast cancer from the chemical content of the noni plant. The compound predicted to have the best interaction with ER α protein was daucosterol. The compounds predicted to have the best interaction with HSP90 protein were (-)-pinoresinol, daucosterol, beta sitosterol, alizarin, nordamnacanthal, rubiadin, rubiadin 1-methyl ether, and soranjidiol. Compounds that have good prediction of ADMET are (-)-pinoresinol, beta sitosterol, and daucosterol.

Key words : Breast cancer, noni plant, *Morinda citrifolia* L., molecular docking, PLANTS, ADMETLab 2.0