

ANALISIS BIOINFORMATIK SENYAWA ANTIKANKER PHYSALIN DARI  
EKSTRAK CIPLUKAN (*Physalis angulata*)

ABSTRAK

Kanker masih menjadi penyakit paling mematikan di dunia, sehingga pencarian akan pengobatan yang lebih efektif dan aman terus dilakukan. Bahan alam dari tumbuhan berpotensi dimanfaatkan sebagai obat kanker baru karena cenderung memiliki toksisitas yang rendah dan aktivitas antikanker yang baik. Ciplukan (*Physalis angulata*) adalah tumbuhan yang banyak ditemukan di Indonesia dan ekstraknya diketahui bersifat sitotoksik terhadap berbagai *cell line* kanker. Ekstrak ciplukan mengandung senyawa Physalin yang hingga saat ini mekanisme aksinya belum sepenuhnya dipahami dengan baik. Dengan semakin berkembangnya basis data bioinformatik, mekanisme aksi suatu senyawa kini dapat diprediksi secara *in silico*. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi mekanisme aksi senyawa antikanker Physalin dari ekstrak Ciplukan menggunakan analisis bioinformatik. Penambatan molekuler dilakukan dengan Physalin D, F, G terhadap protein yang terlibat pada pathway penting pada kanker yaitu AKT1, BRAF, CDK4, ERK2, IKKB, PDK1, PI3K, PSMB5. Semua senyawa Physalin memiliki afinitas yang tinggi terhadap AKT1, ERK2, dan hanya Physalin F yang memiliki afinitas yang baik terhadap PSMB5. Senyawa Physalin berada pada situs aktif yang dimiliki AKT1, ERK2, PSMB5. Selain itu senyawa Physalin membentuk interaksi intramolekuler dengan residu penting yang dimiliki protein. Diduga bahwa efek antikanker Physalin disebabkan melalui penghambatan AKT1, ERK2, dan PSMB5.

**Kata kunci:** Kanker, Ciplukan, *Physalis anuglata*, Bioinformatika

BIOINFORMATIC ANALYSIS OF ANTICANCER COMPOUND PHYSALIN FROM  
CIPLUKAN (*Physalis angulata*) EXTRACT

ABSTRACT

Cancer still the main cause of death worldwide, therefore the search for medication which more effective and safe still developed. Natural compound from plants has potential use as new cancer drug since it has relatively low toxicity and exert good anticancer activity. Ciplukan (*Physalis angulata*) is a plant that found widely in Indonesia and its extract cytotoxic towards various cancer cell line. The ciplukan extract contains Physalin which until now its mechanism of action not very well understood. With the vastly growing bioinformatic database, mechanism of action of a compound can be predicted in silico using molecular docking. This research aims to predict mechanism of action of Physalin from Ciplukan extract using bioinformatic analysis. Molecular docking performed using Physalin D, F, G towards protein involved in the important pathway in cancer which is AKT1, BRAF, CDK4, ERK2, IKKB, PDK1, PI3K, PSMB5. All physalins have high affinity against AKT1, and ERK2; Physalin F has good affinity against PSMB5. All physalin compound located on active site of AKT1, ERK2, PSMB5. Physalin formed intramolecular interaction with the important residue of the protein. Its predicted that anticancer effect caused by inhibition of AKT1, ERK2, and PSMB5.

**Keywords:** Cancer, Ciplukan, *Physalis anuglata*, Bioinformatics