

ABSTRACT

ACTIVE COMPOUND IDENTIFICATION AND MOLECULAR PREDICTION OF ANTI-BREAST CANCER ACTIVITY EXTRACTED FROM MARINE SPONGE *Stylissa massa* (Carter, 1887)

By

CAROLINE LYDIA AULIA

A great source of biodiversity, sponges play an important role in marine pharmacology, a scientific field combining blue biotechnology and natural products pharmacology. *Stylissa massa* sponge species consist of usable bioactives, one of which is an anticancer agent. Breast cancer is the second leading cause of mortality in Indonesia. *Stylissa massa* compounds from the Pahawang Island waters, Lampung, Indonesia were investigated. This study aimed to identify active compounds from *S. massa* which had anti-cancer activity potential in breast cancer. LC-HRMS analysis and molecular docking were used as the research method of investigation. The results showed that compared to the docked hymenamide C with the breast cancer target proteins GRB2 and OXTR, the docked flufenamic acid had a better binding affinity value with the breast cancer target proteins CSF1R, PLK4, MKNK2 and ABL1. The flufenamic acid also showed better RMSD with the native ligand of each target protein, with RMSD close to 0Å. In brief, there were out of at least 12 anticancer compounds from *S. massa*, 2 of them had potential as anti-breast cancer agents (flufenamic acid and hymenamide C). These compounds may had molecular mechanisms as inhibitors of breast cancer target proteins.

Keywords: *Stylissa massa*, breast cancer, molecular docking, LC-HRMS, in silico.

ABSTRAK

IDENTIFIKASI SENYAWA AKTIF DAN PREDIKSI MOLEKULER SENYAWA ANTIKANKER PAYUDARA PADA SPONS *Stylissa massa* (Carter, 1887)

Oleh

CAROLINE LYDIA AULIA

Spons mewakili sumber keanekaragaman hayati yang besar, memainkan peran penting dalam farmakologi kelautan. yaitu bidang studi yang memadukan bioteknologi biru dan farmakologi senyawa alami. Spesies spons *Stylissa massa* diketahui memiliki bioaktif yang dapat dimanfaatkan, salah satunya ialah sebagai senyawa antikanker. Kanker payudara termasuk urutan kedua penyebab kematian terbanyak di Indonesia. Telah dilakukan penelitian senyawa spons *S. massa* yang diperoleh dari perairan Pulau Pahawang, Lampung, Indonesia. Tujuan dari penelitian adalah mengidentifikasi senyawa aktif *S. massa* yang berperan sebagai anti-kanker payudara. Metode penelitian yang digunakan adalah analisis LC-HRMS dan *molecular docking*. Hasil dari penelitian menunjukkan nilai *binding affinity* yang baik dari *docking* senyawa asam flufenamat dengan protein target kanker payudara CSF1R, PLK4, MKNK2, dan ABL1 dibandingkan dengan senyawa hymenamide C dengan protein target kanker payudara GRB2 dan OXTR. Nilai RMSD yang baik juga ditunjukkan oleh senyawa asam flufenamat dengan ligan asli masing-masing protein target di mana nilai RMSD mendekati 0Å. Hasil penelitian dapat disimpulkan bahwa terdapat 2 senyawa aktif *S. massa* yang berpotensi sebagai antikanker payudara (asam flufenamat dan hymenamide C) dari setidaknya 12 senyawa antikanker. Senyawa tersebut diprediksi memiliki mekanisme molekuler sebagai inhibitor pada protein target kanker payudara.

Kata kunci: *Stylissa massa*, kanker payudara, *molecular docking*, LC-HRMS, *in silico*.