MeetingsPremium
MP Journal of Medical Research
Journal of poster communications · ISSN application in progress
Vol. 1 · 2026-0029
OPEN ACCESS

TYPE
Poster communication

SPECIALTY
Oncology

PRESENTED AT
ICABCCI 2026

PUBLISHED
14 October 2026

DOI
10.5281/zenodo.23356787

CORRESPONDENCE
Muhd Hanis Md Idris

KEYWORDS
beta-carboline · chitosan · breast cancer · molecular docking · cytotoxicity · ADMET

LICENSE
CC BY 4.0. © The authors.

POSTER COMMUNICATION · ONCOLOGY

In Silico Discovery and Bioactivity of Beta-Carboline Derivatives as Potential Payloads for Chitosan-Based Breast Cancer Delivery Systems

Muhammad Izzat Izzuddin[1], Noor Hidayah Pungot[1,2], Masnizahani Jamil[3], Sharifah Aminah Syed Mohamad[1,4], Muhd Hanis Md Idris[1,3,4*], Teh Lay Kek[5], Mohd Zaki Salleh[6]

[1] Faculty of Applied Sciences, Universiti Teknologi MARA, 40450 Shah Alam, Selangor, Malaysia
[2] Organic Synthesis Laboratory, Institute of Science (IOS), Universiti Teknologi MARA Selangor, Puncak Alam Campus, 42300 Bandar Puncak Alam, Selangor, Malaysia
[3] Integrative Pharmacogenomics Institute (iPROMISE), Universiti Teknologi MARA Selangor, Puncak Alam Campus, 42300 Bandar Puncak Alam, Selangor, Malaysia
[4] Atta-ur-Rahman Institute for Natural Product Discovery (AuRINs), Universiti Teknologi MARA Selangor, Puncak Alam Campus, 42300 Bandar Puncak Alam, Selangor, Malaysia
[5] Faculty of Pharmacy, Universiti Teknologi MARA Selangor, Puncak Alam Campus, 42300 Bandar Puncak Alam, Selangor, Malaysia
[6] Zakesy Biotech Sdn. Bhd., 3-0, Jalan SM 1, Taman Sunway Batu Caves, 68100 Batu Caves, Selangor, Malaysia
* Corresponding author: Muhd Hanis Md Idris

KEY MESSAGES

1. Les dérivés de bêta-carboline A1b, A1f, A1m et A2a montrent une forte affinité pour les cibles oncologiques et une activité antiproliférative contre les cellules MCF-7.
2. Le composé A1b est le plus puissant avec une IC50 significativement inférieure à celle du tamoxifène.
3. L'encapsulation dans une matrice polymérique à base de chitosane est une solution prometteuse pour surmonter la clairance rapide et les risques toxicologiques des composés.

ABSTRACT

Introduction. Le cancer du sein présente des défis majeurs tels que la prévalence mondiale, la toxicité systémique et la résistance aux médicaments. Les bêta-carbolines sont des composés bioactifs potentiels avec des propriétés anti-inflammatoires et anticancéreuses, mais leur faible biodisponibilité nécessite un système de délivrance avancé. L'identification de candidats adaptés à l'encapsulation dans des matrices à base de chitosane est essentielle pour améliorer l'efficacité thérapeutique.

Materials and methods. Une approche en deux volets a été utilisée : un criblage in silico par docking moléculaire multi-cible contre les récepteurs ER-α, ER-β, l'aromatase et COX-2, suivi d'une validation in vitro par test de cytotoxicité MTT sur des cellules MCF-7. Les propriétés ADMET des composés sélectionnés ont également été évaluées pour prédire leur pharmacocinétique et toxicité.

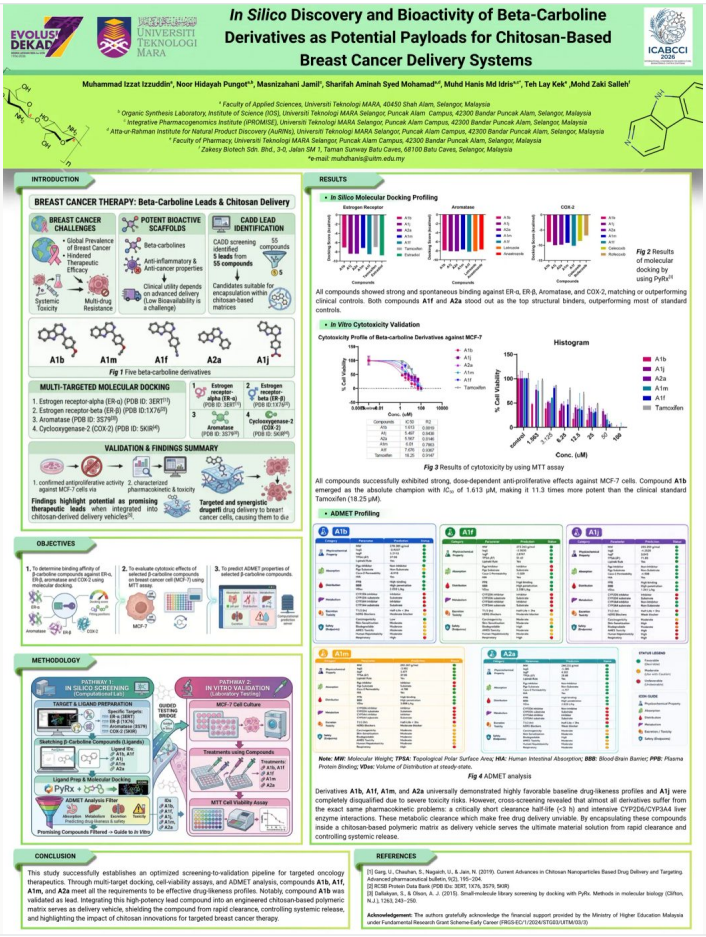
Results. Tous les composés ont montré une forte affinité de liaison aux cibles moléculaires, avec A1f et A2a se démarquant. En test in vitro, tous les composés ont présenté des effets antiprolifératifs dose-dépendants sur les cellules MCF-7, A1b étant le plus puissant. L'analyse ADMET a révélé que A1b, A1f, A1m et A2a ont des profils favorables de drug-likeness, tandis que A1j a été disqualifié pour toxicité. Les composés souffrent cependant d'une clairance rapide et d'interactions enzymatiques, justifiant l'encapsulation dans une matrice polymérique à base de chitosane pour un contrôle de la libération.

Online record, HD poster
journal.meetingspremium.com/p/2026-0029

ABSTRACT (CONTINUED)

Conclusion. Cette étude établit une pipeline optimisée de criblage à validation pour des thérapeutiques oncologiques ciblées. Les composés A1b, A1f, A1m et A2a répondent aux critères d'efficacité et de sécurité, avec A1b validé comme chef de file. L'intégration de ce composé dans une matrice polymérique à base de chitosane permet de protéger contre la clairance rapide et de contrôler la libération systémique, soulignant le potentiel des innovations à base de chitosane pour le traitement ciblé du cancer du sein.

POSTER



REFERENCES

1. Garg, U., Chauhan, S., Nagaich, U., & Jain, N. (2019). Current Advances in Chitosan Nanoparticles Based Drug Delivery and Targeting. Advanced pharmaceutical bulletin, 9(2), 195–204.

2. RCSB Protein Data Bank (PDB IDs: 3ERT, 1X76, 3S79, 5KIR)

3. Dallakyan, S., & Olson, A. J. (2015). Small-molecule library screening by docking with PyRx. Methods in molecular biology (Clifton, N.J.), 1263, 243–250.

CITE THIS PUBLICATION

Izzuddin MI, Pungot NH, Jamil M, Mohamad SAS, Idris MHM, Kek TL, et al. In Silico Discovery and Bioactivity of Beta-Carboline Derivatives as Potential Payloads for Chitosan-Based Breast Cancer Delivery Systems [Poster]. MP J Med Res. 2026;1:2026-0029. doi:10.5281/zenodo.23356787

Vancouver format · APA, BibTeX and RIS on the online record

Original poster in high definition on the online record.

SOURCE
Presented at ICABCCI 2026. Republished with the agreement of the authors.

PROCESS
Record checked by the editorial team, approved by the corresponding author, then reviewed by the journal's editorial board.

INDEPENDENCE
Partners and advertisers take no part in scientific selection.

© The authors. Open access publication under the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) — https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/ license. Published by MeetingsPremium LLC, 75 East 3rd Street, Sheridan, WY 82801, United States.