

ABSTRAK

Kanker payudara merupakan penyakit dengan pembelahan sel abnormal pada jaringan payudara yang dapat menginvasi jaringan sekitarnya dan menyebar ke organ lainnya. Menurut WHO (2014) pada tahun 2012, terjadi 48.998 kasus kanker payudara pada wanita di Indonesia dengan kematian sebesar 19.730 kasus. Pada kanker payudara, overekspresi reseptor estrogen alfa (RE- α) sering terobservasi. Hal ini menyebabkan RE- α menjadi fokus dalam terapi pencegahan dan terapi kanker payudara.

Uji *in vitro* emodin menunjukkan IC₅₀ 2,7 μ M dan Ki 0.77 μ M pada RE- α . Penelitian ini melihat emodin sebagai ligan pada RE- α dan pose emodin pada kantung ikatan RE- α .

Penelitian dilakukan secara *in silico* dengan protokol penambatan dan protokol *post docking analysis* menunjukkan bahwa emodin bukan merupakan ligan aktif pada RE- α . Keluaran berupa ChemPLP dengan rata-rata -75,292 dan PLIF *bitstring*. Interaksi emodin dengan RE- α berikatan pada residu LEU346, LEU387, dan ARG394. Untuk saat ini, protokol yang digunakan belum dapat mengidentifikasi senyawa marginal seperti emodin sebagai ligan aktif pada RE- α .

Kata kunci: Kanker payudara, reseptor estrogen alfa, emodin, *in silico*, penambatan molekul, ChemPLP, PLIF *bitstring*.

ABSTRACT

Breast cancer is a disease with abnormal cell proliferation at breast tissue that can invade the surrounding tissue and spread to another organ. Based on WHO (2014) at 2012, there are 48,998 breast cancer cases on women in Indonesia with 19,730 death cases. In breast cancer, overexpression estrogen receptor alpha (ER- α) usually observed. Hence ER- α became the focus of prevention and therapy for breast cancer.

In vitro study of emodin shows IC₅₀ 2.7 μ M and Ki 0.77 μ M on ER- α . This research visualized emodin as ligand on ER- α and emodin pose in ER- α binding pocket.

In silico research using docking protocol and post docking analysis protocol shown that emodin was not an active ligand on ER- α . The outcome shown as ChemPLP score with average -75.292 and PLIF bitstring. Emodin binds with LEU346, LEU387, and ARG394 residue. Currently, the protocol that used in this research has yet identified marginal compound like emodin as an active ligand on ER- α .

Keywords: Breast cancer, estrogen receptor alpha, emodin, in silico, molecular docking, ChemPLP, PLIF bitstring.

