

INTISARI

Kejadian kanker payudara di Indonesia mencapai 13% dari total seluruh kejadian kanker. Reseptor estrogen alfa ($RE\alpha$) berperan dalam difusi dari estrogen yang dikaitkan dengan induksi dan pertumbuhan kanker payudara. Genistein secara *in vitro* diketahui memiliki aktivitas sebagai antikanker, sehingga untuk menambah informasi tentang kemampuan genistein sebagai ligan antikanker pada $RE\alpha$ dilakukan uji *in silico* terhadap $RE\alpha$.

Pada penelitian ini dilakukan penambatan pada luaran SPORES menggunakan PLANTS1.2. Iterasi penambatan molekul dilakukan tiga kali. Luaran berupa 1000 pose yang mempunyai skorChemPLP dan PLIF *bitstring* yang digunakan untuk menilai keaktifan genistein sebagai ligan dengan *decision tree* pada *post docking analysis* yang digunakan. Pengamatan visual interaksi genistein dengan $RE\alpha$ dilakukan menggunakan PyMol 1.2R1.

Hasil dari penelitian ini adalah genistein merupakan ligan reseptor estrogen alfa ($RE\alpha$). Genistein memenuhi syarat pada *decision tree*, yaitu PLIF *bitstring* 320 *on* dan skor ChemPLP yang lebih kecil dari -84,8200, yaitu -84,9031.

Kata kunci : Kanker payudara, $RE\alpha$, genistein, *in silico*, PLANTS1.2, PyMOL1.2r1., skorChemPLP, PLIF*bitstring*.

ABSTRACT

Breast cancer incidence in Indonesia reached 13% of the total incidence of cancer. Estrogen Receptor Alpha ($ER\alpha$) plays a role in the diffusion of estrogen associated with breast cancer induction and growth. Previous *in vitro* study showed that genistein had anticancer activity, therefore *in silico* study of genistein is needed to add information about the ability of genistein as a ligand on $ER\alpha$.

In this study, the output from SPORES was docked using PLANTS1.2. Iteration of molecular docking had been done three times. The outputs are 1000 poses that have ChemPLP score and PLIF bitstring as the results. They were used to assess the activity of genistein as ligand with the decision tree that was used in post docking analysis. Visual observation of the interaction of genistein with $ER\alpha$ was performed using PyMol 1.2R1.

Results from this study showed that genistein is ligand in the binding pocket of $ER\alpha$. That is because genistein's PLIF bitstring 320 is on and the score of ChemPLP of genistein smaller than -84,8200, i.e., -84,9031 that is in agreement with the decision tree.

Key words : Breast cancer, $ER\alpha$, genistein, *in silico*, PLANTS1.2, PyMOL1.2r1., ChemPLP Scores, PLIF bitstring.