

INTISARI

Kanker payudara merupakan kanker dengan angka kematian tertinggi pada wanita. Reseptor estrogen alfa yang berikatan dengan estrogen akan memicu proliferasi sel kanker payudara, oleh karena itu dapat dijadikan sebagai target terapi untuk kanker payudara. Senyawa fitoestrogen adalah senyawa yang memiliki kemiripan struktur dan fungsi dengan estrogen. Fitoestrogen dapat digunakan untuk terapi kanker payudara. Senyawa 2,6-dihidroksiantraquinon adalah salah satu fitoestrogen dari golongan antraquinon yang telah diuji secara *in vitro* memiliki aktivitas estrogenik

Perlu dilakukan uji *in silico* atas 2,6-dihidroksiantraquinon sebagai ligan reseptor estrogen alfa untuk mengetahui interaksi ligan reseptor. Sebelumnya telah dikembangkan protokol penapisan virtual dengan menggunakan aplikasi penambatan molekuler PLANTS versi 1.2 yang telah divalidasi oleh Setiawati *et al.*(2014). Protokol yang telah divalidasi ini akan digunakan untuk menguji interaksi 2,6-dihidroksiantraquinon dalam kantung ikatan reseptor estrogen alfa. Analisis hasil dilakukan dengan menggunakan aplikasi statistik R versi 3.0.2 dengan metode yang telah dikembangkan oleh Istyastono (2015) dan visualisasi pose ikatan dibuat dengan PyMol versi 1.2.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa 2,6-dihidroksiantraquinon bukan merupakan ligan aktif di reseptor estrogen alfa. Metode yang digunakan tidak dapat mengidentifikasi senyawa 2,6-dihidroksiantraquinon yang tergolong dalam senyawa marginal aktif sebagai ligan. Perlu dilakukan pengembangan metode yang dapat mengidentifikasi senyawa marginal sebagai ligan,

Kata kunci: *In silico*, reseptor estrogen alfa, kanker payudara, 2,6-dihidroksiantraquinon.

ABSTRACT

Breast cancer is a type of cancer with the highest mortality rate in females. Estrogen receptor alpha that binds to estrogen may increase cancer cell proliferation, thus estrogen receptor alpha can be targeted to cure breast cancer. Phytoestrogens are substances that have similar structure and activity with estrogen. Phytoestrogens can be used as therapeutic agent for breast cancer. 2,6-Dihydroxyanthraquinone is one of phytoestrogens from anthraquinon group which has shown estrogenic activity in previous in vitro study

In silico study is needed to test whether 2,6-dihydroxyanthraquinone is a ligand of estrogen receptor alpha. Setiawati et al. (2014) has established a valid protocol for Structure Based Virtual Screening using molecular docking software PLANTS 1.2. This protocol will be used to test 2,6-dihydroxyanthraquinone as ligand for estrogen receptor alpha. Output from the protocol is analyzed using a post-docking analysis method developed by Istyastono (2015) in R 3.0.2. Visualization of binding pose is generated with PyMOL 1.2.

Results show that 2,6-dihydroxyanthraquinone cannot be identified as a ligand of estrogen receptor alpha. The method used in this study is not suitable to identify 2,6-dihydroxyanthraquinone, which is a marginal active substance, as active ligand. Further study to develop a suitable method to identify marginal active substances as ligands in estrogen receptor alpha is needed.

Keywords: *In silico*, estrogen receptor alpha, breast cancer, 2,6-dihydroxyanthraquinone