

## ABSTRAK

Kanker payudara merupakan salah satu jenis kanker yang sering terdiagnosis pada wanita dan merupakan penyebab kematian kedua dalam kasus kematian yang disebabkan oleh kanker. Perkembangan sel kanker payudara ditandai dengan tingginya ekspresi reseptor estrogen alfa. Primaquine merupakan obat antimalaria, digunakan sebagai agen eradikasi terhadap parasit *Plasmodium vivax* dan *Plasmodium ovale*. Tujuan terapi baru dari sebuah obat atau *drug repurposing* merupakan strategi baru dalam penemuan obat antikanker, yaitu untuk mengidentifikasi obat non-antikanker yang memiliki aktivitas antikanker. Penelitian ini bertujuan untuk menguji senyawa primaquine sebagai ligan pada reseptor estrogen alfa secara *in silico* menurut protokol yang telah dikembangkan oleh Setiawati *et al.* (2014) dan metode analisis pasca penambatan oleh Istiyastono (2015). Perangkat lunak penambatan yang digunakan adalah PLANTS 1.2 dan analisis hasil menggunakan *shell script* yang mengacu *decision tree*, serta visualisasi pose ikatan dibuat dengan PyMOL versi 1.8.4.

Hasil analisis menunjukkan senyawa primaquine inaktif sebagai ligan dari reseptor estrogen alfa. Selanjutnya dilakukan pengelompokan berdasarkan tujuh jalur pada *decision tree* untuk mengetahui nilai persen kesesuaian primaquine sebagai ligan reseptor estrogen alfa. Hasil pengelompokan menunjukkan persen kesesuaian terbesar adalah 80% yang memenuhi aturan jalur ke enam *decision tree*. Visualisasi pose primaquine menggunakan aplikasi PyMOL v1.8.4 dengan replikasi ke 739, iterasi ke 1 dan skor chemPLP  $\geq -118.40$ .

Kata kunci: Reseptor estrogen alfa, *drug repurposing*, *in silico*, primaquine.

## ABSTRACT

Breast cancer is the most prevalent case of cancers in female and also the second highest cancer related mortality. The progress of breast cancer cells is characterized by high expression of estrogen receptor alpha. Primaquine is used as an antimalarial agent based on its ability to eradicate *Plasmodium vivax* and *Plasmodium ovale* parasite. Drug repurposing refers to a reinvestigation of existing drugs includes the anticancer drug for new therapeutic interventions. This study aims to examine *in silico* on primaquine as a ligand of estrogen receptor alpha according to protocols that have been developed by Setiawati et al. (2014) and post-docking analysis developed by Istyastono (2015). The software used was PLANTS 1.2 and the result was analysed using a shell script that refers to the decision tree, and visualization using PyMOL 1.8.4.

The results showed that primaquine was inactive as a ligand of the estrogen receptor alpha. Furthermore, the scoring is as cluster more based on seven paths of the decision tree to determine the suitability value of primaquine as a ligand. The results showed the largest suitability value was 80% which followed the sixth path of the decision tree. Finally, the primaquine's pose inside estrogen receptor alpha binding pocket was visualized using PyMOL 1.8.4 at replication 739, iteration 1 and ChemPLP score was  $\geq -118,40$ .

Keywords: Estrogen receptor alpha, drug repurposing, *in silico*, primaquine.