

**SIMULASI PENAMBATAN MOLEKULER GENISTEIN PADA
RESEPTOR ESTROGEN ALFA**

Oleh:

Ricardo Kenny Chandra

NIM: 108114186

INTISARI

Kanker payudara merupakan jenis kanker yang paling sering ditemui di seluruh dunia dan mencakup 16% dari seluruh kejadian kanker pada wanita. Dua dari tiga prevalensi kanker payudara yang terjadi disebabkan adanya *over*-ekspresi reseptor estrogen alfa (RE α). Genistein, salah satu senyawa fito-estrogen diketahui dapat berinteraksi dengan beberapa protein dalam tubuh, salah satunya adalah RE α .

Pada penelitian ini, dilakukan penapisan genistein sebagai ligan untuk RE α dengan menggunakan perangkat lunak PLANTS1.2 dan *Python-based protein-ligand interaction fingerprinting* (PyPLIF). Hasil yang didapatkan, divisualisasikan untuk mengetahui bagaimana genistein berinteraksi di dalam kantung ikatan RE α menggunakan perangkat lunak PyMOL1.2.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa secara statistik protokol yang dikembangkan oleh Radifar *et al.* (2013) tidak dapat mengenali genistein sebagai ligan RE α dan tidak dapat digunakan untuk elusidasi mode ikatan genistein karena tidak mampu mereproduksi mode ikatan ligan *co-crystal* yang digunakan. Elusidasi mode ikatan dilakukan dengan menggunakan parameter ChemPLP dan teridentifikasi setidaknya tiga mode ikatan genistein pada RE α .

Kata kunci: Kanker payudara, genistein, RE α , *in silico* screening, penambatan molekuler, PLANTS1.2, PyPLIF

ABSTRACT

Breast cancer is the most frequent cancer worldwide and cover 16% of total cancer incidence on woman. Two out of three breast cancer prevalence are caused by estrogen receptor alpha (ER α) overexpression. Genistein, one of pyhto-estrogen is known for its ability to interact with some proteins, one of which is ER α .

Screening genistein as ligand for ER α was mainly completed using PLANTS1.2 and *Python-based protein-ligand interaction fingerprinting* (PyPLIF) software. The results were visualized to examine how genistein interact with binding pocket of ER α using PyMOL1.2 software.

Statistically, the result shown that the protocol developed by Radifar *et al.* (2013) could not recognize genistein as ligand for ER α and could not reproduce co-crystal binding mode. Therefore, the protocol could not be used to elucidate genistein binding mode. To elucidate genistein binding mode, ChemPLP parameter was used and at least three genistein binding mode were found.

Keywords: Breast cancer, genistein, ER α , in silico screening, molecular docking, PLANTS1.2, PyPLIF