

UJI *IN SILICO* BIOCHANIN-A SEBAGAI LIGAN PADA RESEPTOR ESTROGEN ALFA

Karla Violetta
128114012

INTISARI

Kanker payudara merupakan salah satu jenis kanker yang paling banyak terjadi di seluruh dunia. Sekitar 1,7 miliar wanita dari seluruh wanita yang terkena kanker mengalami kanker payudara. Salah satu penyebab terjadinya kanker payudara adalah ekspresi berlebih reseptor estrogen alfa (RE- α). Uji *in vitro* menunjukkan *biochanin-a* merupakan ligan di RE- α . Penelitian bertujuan untuk menguji kemampuan *biochanin-a* sebagai ligan RE- α secara *in silico*, mengetahui dan menguji kemampuan protokol penambatan virtual untuk mengenali *biochanin-a* sebagai ligan RE- α , dan mengetahui pose *biochanin-a* dalam kantung ikatan RE- α .

Pengujian ini dilakukan dengan protokol penambatan virtual yang telah dikembangkan dan telah divalidasi oleh Setiawati *et al.* (2014). Analisis hasil dilakukan menggunakan aplikasi statistik R 3.0.2 dengan metode *recursive partition and regression tree* (RPART) yang telah dikembangkan oleh Istyastono (2015) dan visualisasi pose ikatan dibuat dengan PyMol 1.2.

Hasil penelitian menunjukkan skor ChemPLP terendah senyawa *biochanin-a* adalah -76,8508. *Biochanin-a* berikatan dengan residu ARG 394 dengan ikatan hidrogen. Hasil analisis dengan *decision tree* menunjukkan *biochanin-a* merupakan *decoy*, sehingga protokol tidak dapat mengenali *biochanin-a* sebagai ligan. Dapat disimpulkan perlu dilakukan pengembangan protokol yang dapat mengidentifikasi *biochanin-a* sebagai ligan.

Kata kunci: Kanker payudara, *biochanin-a*, RE- α , *in silico* screening, penambatan molekul, PLANTS1.2, ChemPLP, SPORES, R 3.0.2, metode RPART, *decision tree*.

IN SILICO STUDY BIOCHANIN-A COMPOUND AS LIGAND ON RECEPTOR ESTROGEN ALPHA

Karla Violetta
128114012

ABSTRACT

Breast cancer is one of the types of cancer with the highest incidence in the world. Around 1.7 billion women have breast cancer from all women in the world that have cancer. One of the causes of breast cancer is overexpression of estrogen receptor alpha (ER- α). *In vitro* study of biochanin-a shown that biochanin-a act as ligand in ER- α . This research's goals is to test biochanin-a's ability as a ligand in ER- α in a *in silico* test, to know and test the virtual docking protocol's ability to detect biochanin-a as a ligand in ER- α , and to know biochanin-a's pose in the binding site of ER- α .

This research is done with virtual docking protocol that had been developed by Setiawati *et al.* (2014). The analysis of the results is done using statistic application R 3.0.2 with recursive partition and regression tree (RPART) method that have been developed by Istyastono (2015) and the visualization of binding pose is made using PyMol 1.2.

The results had shown the lowest ChemPLP score of biochanin-a is -76.8508. Biochanin-a bonds with ARG 394 residue in form of hydrogen bond. The result from decision tree's analysis shown that biochanin-a is a decoy, so the protocol was unable to detect biochanin-a as a ligand. Further development is needed to make a protocol that able to identify biochanin-a as ligand in ER- α .

Key words: Breast cancer, biochanin-a, ER- α , *in silico* screening, molecular docking, PLANTS1.2, ChemPLP, SPORES, R 3.0.2, RPART method, decisiontree.