

## ABSTRAK

Kanker payudara merupakan kanker yang menjadi penyebab kematian kedua pada wanita di dunia. Reseptor estrogen alfa (RE $\alpha$ ) yang berikatan dengan estrogen adalah pemicu proliferasi pada sel kanker payudara, oleh karena itu RE $\alpha$  merupakan salah satu target untuk terapi kanker payudara. Penelitian ini bertujuan untuk menguji secara *in silico* kemampuan senyawa *quinocide* sebagai ligan RE $\alpha$  dan mengetahui pose ikatan *quinocide* pada RE $\alpha$ . Uji *in silico* dilakukan menggunakan metode penambatan Penapisan Virtual Berbasis Struktur (PVBS) dengan protokol Setiawati *et al.* (2014) yang telah dimodifikasi oleh Istyastono (2015) dan divisualisasikan dengan PyMol versi 1.8.4.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa *quinocide* bukan merupakan ligan aktif di RE $\alpha$ . Tidak terjadi interaksi antara senyawa *quinocide* dengan GLY521. Perlu dilakukan modifikasi senyawa agar dapat terjadi interaksi antara *quinocide* dengan residu GLY521.

**Kata Kunci:** *Quinocide*, kanker payudara, PVBS, reseptor estrogen alfa (RE $\alpha$ ), uji *in silico*



## ABSTRACT

Breast cancer is the second major cause of women's death in the world. Estrogen receptor alpha ( $ER\alpha$ ) that binds to estrogen is a trigger of proliferation in breast cancer cells. Therefore,  $ER\alpha$  was one of targets used in breast cancer therapy. The aim of this study was to carry out *in silico* test by examining the ability of the quinocide as a ligand for  $ER\alpha$  and to determine the binding pose of quinocide on  $ER\alpha$ . The *in silico* test was performed using Structure Based Virtual Screening (SBVS) method utilizing protocol developed by Setiawati et al. (2014) which had been appended by Istyastono (2015) and visualized by PyMOL version 1.8.4.

The results showed that quinocide inactive ligand for  $ER\alpha$ . Quinocide has no interaction with GLY521. Therefore, the quinocide should be modified into new model that can interact with GLY521 residues.

**Keywords:** Quinocide, breast cancer, SBVS, estrogen receptor alpha ( $ER\alpha$ ), *in silico* test

