

ABSTRAK

Latar Belakang: Kanker payudara memiliki urutan kedua sebagai jenis kanker yang sering dijumpai pada wanita, setelah kanker serviks di Indonesia. Senyawa fitoestrogen adalah senyawa yang banyak diteliti karena memiliki aktivitas antikanker, termasuk untuk kanker payudara. Penelitian ini menampilkan metode *in silico* dari senyawa fitoestrogen sebagai inhibitor reseptor estrogen α yang diasosiasikan dengan kanker payudara.

Tujuan: Mengetahui potensi berbagai senyawa fitoestrogen sebagai inhibitor pada reseptor estrogen α secara *in silico*.

Metode: Simulasi *docking* dilakukan untuk menunjukkan hasil visualisasi dalam tingkatan molekuler interaksi antara lima senyawa fitoestrogen dengan reseptor estrogen α dengan pembandingan tamoxifen dan dilanjutkan dengan menguji potensi toksisitas senyawa fitoestrogen dengan menggunakan aplikasi berbasis *website* PKCSM.

Hasil: *Docking* menunjukkan bahwa senyawa coumestrol, curcumol, daidzein, emodin, dan genistein diprediksi memiliki potensi sebagai inhibitor reseptor estrogen α . Senyawa dengan potensi terbaik adalah coumestrol namun skor *docking* dari kontrol tamoxifen masih lebih baik dari lima senyawa fitoestrogen. Sementara pada uji toksisitas diprediksi memiliki toksisitas berturut-turut dari tertinggi ke yang terendah adalah tamoxifen, coumestrol, curcumol, daidzein, emodin, dan genistein.

Kesimpulan: Lima senyawa fitoestrogen memiliki potensi aktivitas dan toksisitas sebagai inhibitor estrogen α yang lebih rendah dibandingkan tamoxifen berdasarkan kajian *in silico*.

Kata Kunci: fitoestrogen, uji *in silico*, *docking*, reseptor estrogen α

ABSTRACT

Background: Breast cancer is the second place as the most common cancer in women, after cervical cancer in Indonesia. Phytoestrogen compounds are compounds that are widely studied because they have anticancer activity, including breast cancer. This study presents an in silico method of phytoestrogen compounds as estrogen receptor α inhibitors commonly associated with breast cancer.

Objective: To determine the potency of various phytoestrogens as inhibitors of the estrogen receptor α with in silico method.

Methods: Docking simulation are carried out to visualize the molecular level interactions between five phytoestrogen compounds and estrogen receptors α with tamoxifen as a comparative compound and continued with the testing of toxicity potential of phytoestrogen compounds using the PKCSM website-based application.

Results: Docking showed that coumestrol, curcumol, daidzein, emodin, and daidzein were predicted to have potential as estrogen receptor α inhibitor. Coumestrol has the greatest potential as inhibitor even though the docking score shows that tamoxifen has greater result compared to the five phytoestrogen compound. While on the toxicity test it is predicted to have the highest toxicity are coumestrol, curcumol, daidzein, emodin, and genistein respectively.

Conclusion: The five tested phytoestrogen compounds have lesser potential activity and toxicity as estrogen receptor α inhibitor compared to tamoxifen based on in silico studies.

Keywords: phytoestrogens, in silico , docking, estrogen receptor α