

ABSTRAK

Reseptor *Human Epidermal Growth Factor Receptor 2* atau HER2 adalah salah satu target terapi pada kanker payudara dikarenakan HER2 sering mengalami overekspresi dan merupakan reseptor tirosin kinase transmembran yang mengatur pembelahan serta pertumbuhan sel. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh prediksi interaksi senyawa bioaktif sebagai *inhibitor* pada protein dan memperoleh residu dan gugus penentu pada kekuatan interaksi protein dan ligan bioaktif. Penelitian menggunakan struktur 3D protein, dengan cyanidin dan peonidin-3-glukosida sebagai senyawa bioaktif serta lapatinib sebagai kontrol positif. Tahapan meliputi preparasi dan validasi struktur, konfirmasi posisi ligan, simulasi pada ekuilibrase suhu 300 K dan tekanan 1 bar, lalu analisis RMSD, dan energi interaksi elektrostatik serta van der Waals. Hasilnya, peonidin-3-glukosida memiliki energi interaksi lebih rendah, kompleks yang stabil, dan lebih banyak ikatan kuat dengan residu aktif, termasuk Ala-751 dan Val-734. Temuan tersebut menandakan afinitas lebih tinggi dan mekanisme inhibisi peonidin-3-glukosida lebih efektif dibanding cyanidin, sehingga peonidin-3-glukosida dapat dijadikan sebagai *inhibitor* pada HER2.

Kata Kunci: HER2, *lapatinib*, *cyanidin*, *peonidin*, *molecular dynamics*