

ABSTRAK

Fani Rahmawati, 24020219130043. Studi *In Silico* Asam Benzoat dari *Ramalina* sp. sebagai Inhibitor VEGF-A dan EGFR pada *Triple Negative Breast Cancer*, Di Bawah Bimbingan Dr. Dra. Arina Tri Lunggani, M.Si. dan Puspa Hening, S.Pd.,M.Biotech.

Triple Negative Breast Cancer (TNBC) merupakan kanker payudara agresif dan tidak memiliki terapi target spesifik karena tidak mengekspresikan reseptor ER, PR, dan HER2, sehingga diperlukan kandidat obat baru yang lebih efektif. Contoh target potensial pada TNBC adalah protein *Vascular Endothelial Growth Factor* (VEGF) dan *Epidermal Growth Factor Receptor* (EGFR). Penelitian ini bertujuan menganalisis interaksi molekuler asam benzoat dari *lichen Ramalina* sp. dengan VEGF-A dan EGFR melalui *molecular docking* serta mengevaluasi profil farmakokinetik dan toksisitasnya (ADMET). Struktur ligan asam benzoat diunduh dari PubChem dengan ID 243, sedangkan struktur protein reseptor VEGF-A dan EGFR diunduh dari RCSB PDB dengan ID 6Z3F dan 6LUD. *Molecular docking* dilakukan menggunakan AutoDock Vina pada PyRx, visualisasi interaksi menggunakan PyMol dan BIOVIA Discovery Studio, analisis ADME melalui ADMET-AI dan analisis toksisitas melalui GUSAR. Hasil penelitian menunjukkan nilai *binding affinity* terbaik asam benzoat adalah $-4,9$ kcal/mol pada VEGF-A dan $-5,6$ kcal/mol pada EGFR, serta mampu membentuk interaksi penting dengan residu kedua reseptor berupa ikatan hidrogen dan hidrofobik. Analisis farmakokinetik menunjukkan hasil asam benzoat memenuhi seluruh parameter *Lipinski's Rule of Five* dan prediksi toksisitasnya tergolong rendah (*Class 5*). Dengan demikian, asam benzoat berpotensi sebagai kandidat awal inhibitor VEGF-A dan EGFR namun masih perlu validasi lanjutan melalui uji *in vitro*, *in vivo*, dan analisis ADMET tingkat lanjut.

Kata kunci: TNBC, asam benzoat, VEGF, EGFR, *molecular docking*.