

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan penambatan molekuler yang dilakukan, besaran energi ikatan yang diperoleh dari senyawa – senyawa antikanker tersebut berkisar antara -6,5 sampai -9,5 dengan nilai terendah dimiliki oleh kurkumin, pinocembrin, dan pinostrobin. Jenis ikatan yang umum terjadi yaitu interaksi hidrofobik. Kemudian, data uji Lipinski menunjukkan 10 senyawa, diantaranya alashanoid B, andrografolid, sinamaldehida, kurkumin, EPMC, galangin, gamma mangostin, pinocembrin, pinostrobin, dan xanthorizol telah memenuhi aturan Lipinski sehingga memiliki potensi untuk dikembangkan menjadi senyawa kandidat terapi adjuvan inhibitor HER-2 secara oral. Maka dari itu, pinostrobin, kurkumin dan pinocembrin merupakan kandidat terbaik sebagai terapi inhibitor HER-2.

B. Saran

Interaksi antara senyawa dan target enzim HER-2 tersebut perlu diteliti lebih lanjut terkait simulasi dinamika molekuler dan mekanika molekuler untuk mengetahui stabilitas kompleks dan memperkuat validasi nilai energi ikatan.