

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, diperoleh kesimpulan sebagai berikut

1. Interaksi yang terjadi antara ligan senyawa 2,4,6-Trinitrofenilhidrazon kаланon dengan protein sel kanker payudara Her- α berupa ikatan hidrogen pada residu Trp³⁸³ dan Cys⁵³⁰ dan interaksi hidrofobik pada residu Thr³⁴⁷, Asp³⁵¹, Leu³⁵⁴, Leu⁵²⁵, Met⁵²², Tyr⁵²⁶, Met⁵²⁸, Lys⁵²⁹, Val⁵³³, Leu⁵³⁶, Leu⁵³⁹.
2. Interaksi yang terjadi antara ligan senyawa 2,4,6-Trinitrofenilhidrazon kаланon dengan protein sel kanker paru-paru EGFR berupa ikatan hidrogen pada residu Asp⁸⁴² dan interaksi hidrofobik pada residu Lys⁷¹⁶, Leu⁷¹⁸, Gly⁷¹⁹, Ser⁷²⁰, Phe⁷²³, Val⁷²⁶, Ala⁷⁴³, Lys⁷⁴⁵, Leu⁷⁸⁸, Met⁷⁹⁰, Leu⁷⁹², Met⁷⁹³, Pro⁷⁹⁴, Gly⁷⁹⁶, Cys⁷⁹⁷, Asp⁸⁰⁰, Glu⁸⁰⁴, Arg⁸⁴¹, Leu⁸⁴⁴, Thr⁸⁵⁴, Asp⁸⁵⁵.
3. Senyawa 2,4,6-Trinitrofenilhidrazon kаланon tidak berpotensi sebagai obat anti kanker payudara terhadap protein Her- α dengan hasil penambatan molekul berupa nilai ΔG sebesar -7,7 kkal/mol dan nilai Ki sebesar 2,26 μM .
4. Senyawa 2,4,6-Trinitrofenilhidrazon kаланon berpotensi sebagai obat anti kanker paru-paru terhadap protein EGFR dengan hasil penambatan molekul berupa nilai ΔG sebesar -9,9 kkal/mol dan nilai Ki sebesar $5,52 \times 10^{-2} \mu M$.

5.2. Saran

1. Melakukan penelitian lebih lanjut dengan dinamika molekuler pada senyawa 2,4,6,-Trinitrofenilhidrazon kаланon terhadap kanker paru-paru;
2. Merancang senyawa baru dengan senyawa kаланon sebagai struktur dasar untuk mendapatkan senyawa turunan yang memiliki afinitas dan daya hambat yang baik.