

BAB V

KESIMPULAN

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian, diperoleh kesimpulan sebagai berikut:

1. Hasil penambatan molekul menggunakan HADDOCK 2.4 menunjukkan bahwa peptida EQQQQQQEESEVQR (P7) membentuk ikatan yang cukup stabil dengan reseptor HER2 dengan afinitas ikatan sebesar -11.6 kkal/mol. Adapun penambatan molekul menggunakan server CABS-dock juga menunjukkan EQQQQQQEESEVQR (P7) memiliki pengikatan yang paling stabil dengan nilai afinitas ikatan -11.3 kkal/mol.
2. Interaksi spesifik yang terbentuk pada penambatan molekul menggunakan HADDOCK 2.4 antara EQQQQQQEESEVQR (P7) dengan reseptor HER2 yaitu ikatan hidrogen Cys805, Arg849 sebanyak 3 ikatan, Ser728, Gly732, Arg897, Gly882, Phe731, Ala730, dan Val884 dengan panjang ikatan berkisar 2.63–3.15 Å, sedangkan pada interaksi hidrofobik terbentuk 15 interaksi. Adapun penambatan molekul menggunakan CABS-dock antara EQQQQQQEESEVQR (P7) dengan reseptor HER2 membentuk 4 ikatan hidrogen pada residu asam amino Lys736, Ser1007, Lys921, Glu914 pada panjang ikatan 2.73–3.35 Å dan 16 interaksi hidrofobik.

5.2. Saran

Berdasarkan penelitian ini, maka saran yang perlu dilakukan pada penelitian lebih lanjut yaitu terkait studi *in silico* melalui *molecular dynamics* sebagai validasi penambatan molekul.