

BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Hasil analisis berdasarkan aturan Lipinski dan toksisitas menunjukkan bahwa dari 1036 senyawa flavonoid terpenilasi terdapat enam senyawa, yaitu senyawa xanthoangelol D, derricidine, xanthoangelol J, lespeol, TB2, dan TB3 yang memenuhi parameter Lipinski dan toksisitas. Hasil penambatan enam senyawa tersebut menunjukkan bahwa terdapat dua senyawa uji yang berpotensi sebagai kandidat protein EGFR namun senyawa uji kurang berpotensi sebagai kandidat protein C-MET. Pada protein EGFR, dua senyawa uji yaitu senyawa TB2 dan TB3 memiliki *binding affinity* yang lebih negatif (-8,5 kkal/mol dan -8,6 kkal/mol) daripada kontrol positif (-8,4 kkal/mol) dan jumlah interaksi residu penting yang sama banyaknya dengan kontrol positif, yaitu sebanyak 4 ikatan. Pada protein C-MET, senyawa uji memiliki *binding affinity* dan jumlah interaksi dengan residu penting yang tidak lebih baik dari kontrol positifnya.

B. Saran

Perlu dilakukan studi lanjutan berupa *molecular dynamic* untuk mengetahui bagaimana interaksi senyawa uji dengan protein targetnya yang dinamis dan sesuai dengan kondisi tubuh.