

## BAB V PENUTUP

### 5.1. Kesimpulan

Dari hasil penelitian dan pembahasan diatas, dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut.

1. Deskriptor yang paling berpengaruh dari 9 (sembilan) prediktor yang digunakan yaitu, koefisien partisi (logP) dan topologi permukaan polar (TPSA) yang termasuk dalam parameter hidrofobik; refraktivitas molar (mr) dan globularitas (glob) yang termasuk dalam parameter sterik.

2. Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktifitas (HKSA) terbaik senyawa turunan flavonoid sebagai inhibitor HER2-TK terdapat pada persamaan berikut :

$$IC_{50\text{-pred}} = 9.761*\text{glob}\pm 6.079 - 0.430*\text{mr}\pm 0.087 + 0.025*\text{TPSA}\pm 0.004 + 0.830*\text{LogP}\pm 0.122 + 2.737\pm 0.761\dots\dots\dots \quad (\text{persamaan 18})$$

dengan n = 33, r = 0.895, r<sup>2</sup>=0.801, F<sub>hit</sub>=28.272, SE= 0.25334, Sig = 0.000, q<sup>2</sup>=1.9864

3. Senyawa-senyawa yang memiliki aktivitas lebih baik dari senyawa penuntun (F50=2.73 µg/ml) adalah senyawa dengan substituen -H(FD01), -OCH<sub>3</sub>(FD07), -COCH<sub>3</sub>(FD09), -NO<sub>2</sub>(FD10), -NH<sub>2</sub>(FD11) dan -CN(FD12) dengan nilai aktivitas teoritis berturut-turut 2.687 µg/ml, 2.384 µg/ml, 2.583 µg/ml, 2.385 µg/ml, 2.664 µg/ml, dan 2.443 µg/ml.

4. Interaksi senyawa baru dengan reseptor HER2-TK menunjukkan nilai ΔG < 0. Hal ini berarti semua senyawa baru yang telah dirancang memiliki aktivitas lebih baik berkemampuan untuk berikatan secara spontan dengan reseptor. Dimana masing-masing ligan tersebut yang berikatan dengan HER2-TK yang ditandai dengan nilai ΔG, adalah FD01 (senyawa 8,4'-Natrium dioksida) adalah -7.94093 kcal/mol, FD07 (senyawa 7-Methyloksid, 8,4'-Natrium dioksida) adalah -7.68009 kcal/mol, FD09 (senyawa 7-COCH<sub>3</sub>,8,4'-Natrium dioksida) adalah -7.94234 kcal/mol, FD10 (senyawa 7,8,4'-Natrium dioksida) adalah -8.06115 kcal/mol, FD11 (senyawa 7-Natrium hidroksida,8,4'-Natrium dioksida) adalah -8.49593 kcal/mol, dan FD12 (senyawa 7-Sianida,8,4'-Natrium dioksida) adalah -7.09570 kcal/mol.

Dari hasil penelitian semua turunan senyawa baru memiliki interaksi ikatan hidrogen. Gugus –N dan –O dari ligan menunjukkan ikatan terjadi antara ligan dengan gugus asam amino pada reseptor.

## **5.2. Saran**

1. Sebaiknya perlu dilakukan *in-silico screening* lebih lanjut menggunakan senyawa turunan flavonoid dengan model pendekatan modifikasi senyawa yang berbeda sehingga akan didapatkan lebih banyak lagi senyawa dengan aktivitas yang lebih baik sebagai inhibitor HER-2 TK pada sel kanker payudara.
2. Perlu dilakukan uji lebih lanjut tentang aktivitas senyawa sebagai inhibitor HER-2 TK pada sel kanker payudara.