

BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan analisis terhadap hasil simulasi *docking* yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa rimpang dari tanaman *Curcuma zedoaria* berpotensi sebagai inhibitor protein reseptor HER2 pada sel kanker payudara dengan membentuk beragam interaksi yaitu ikatan hidrogen, ikatan kation- π , ikatan π - π , ikatan π -H dan interaksi Van der Waals. Hasilnya menunjukkan bahwa enam dari 33 senyawa dari rimpang *C. zedoaria* memiliki afinitas paling kuat yaitu dihydrocurcumin, curcumin, tetrahydrodemethoxycurcumin, zerumin A, demethoxycurcumin dan bisdemethoxycurcumin dengan afinitas sebesar 7,4359 kcal/mol, -6,8372 kcal/mol, -6,6454 kcal/mol, -6,3360 kcal/mol, -6,3148 kcal/mol and -6,3148 kcal/mol, berturut-turut. Afinitas penghambatan senyawa-senyawa tersebut hampir sama dengan afinitas lapatinib sebagai senyawa acuan untuk kemampuan inhibitor HER2.

5.2 Saran

Pada penelitian berikutnya disarankan untuk melakukan simulasi *docking* dengan menggunakan jenis fungsi skor yang berbeda seperti CHARM77, OPLS-AA, MMFF94x, Amber 94 dan lain sebagainya.

