

| Senyawa | HeRG |
|---------|---------------|
| 3 | resiko sedang |
| 4 | resiko sedang |
| 7 | resiko sedang |
| 10 | resiko sedang |
| 13 | resiko sedang |
| 14 | resiko sedang |
| 21 | resiko sedang |
| 23 | resiko sedang |
| 25 | resiko sedang |

Dapat disimpulkan pada tabel diatas bahwa tidak ada satupun yang memiliki resiko tinggi atau inhibitor kuat terhadap jantung. Semakin tinggi tingkat inhibisi heRG maka senyawa tersebut semakin berbahaya bagi tubuh. Hal ini disebabkan karena semakin tinggi tingkat inhibisi, semakin terhambat pula aliran protein kanal.Terhambatnya aliran ini akan menyebabkan aktivitas detak jantung semakin terganggu.

BAB VI. SIMPULAN DAN SARAN

6.1. Simpulan

1. Berdasarkan hasil docking 32 senyawa uji terhadap protein CDK-2 diperoleh nilai energi bebas ikatan yang < 0 sehingga diprediksi memiliki potensi sebagai inhibitor protein CDK-2. terdapat 4 ligan uji yang lebih baik afinitasnya antara lain ligan uji dengan kode 3,4,7,10,13,14,21,23,25 dan 26. Namun dari 10 ligan uji tersebut ligan yang memiliki nilai ΔG dan K_i terbaik adalah ligan uji kode 26 dengan nilai ΔG nilai energi bebas ikatan $-7,53$ kcal/mol dan Konstanta inhibisi $3,01$ nM.
2. Berdasarkan prediksi toksisitas secara *in silico*, terdapat 2 senyawa uji bersifat non mutagen, 6 senyawa uji bersifat non karsinogen dan 10 senyawa uji memiliki memiliki resiko sedang terhadap jantung. Senyawa uji teraman yakni senyawa uji kode 23 karena bersifat non mutagen, non karsinogen, dan resiko sedang terhadap jantung.

6.2 Saran

1. Untuk peneliti selanjutnya dilakukan simulasi dinamika molekul agar memperoleh data stabilitas interaksi ikatan yang lengkap dan mengetahui potensi senyawa uji sebagai kadindat inhibitor CDK2.
2. Dilakukan prediksi toksisitas secara *in silico* terhadap parameter uji lainnya.