

BAB VI

PENUTUP

6.1 Kesimpulan

Berdasarkan penelitian ini dapat disimpulkan bahwa:

1. Hasil penambatan molekul dari 80 senyawa uji terhadap reseptor estrogen alfa, didapatkan 10 senyawa uji yang nilainya lebih baik dari ligan alami yaitu LU90, LU18, LU65, LU52, LU17, LU4, LU10, LU2, LU20 dan LU3 dengan nilai K_i dan ΔG dengan nilai berturut-turut -8,95 kcal/mol dan 0,27 μ m; -8,46kcal/mol dan 0,63 μ m; -8,43kcal/mol dan 0,66 μ m; -8,38kcal/mol dan 0,71 μ m; -8,37kcal/mol dan 0,73 μ m, -8,30kcal/mol dan 0,80 μ m; -8,29,kcal/mol dan 0,84 μ m; -8,28,kcal/mol dan 0,85 μ m;-8,24,kcal/mol dan 0,92 μ m; -8,23,kcal/mol dan 0,93 μ m.
2. Hasil analisis dinamika molekul pada senyawa LU90, LU18, LU65, LU52, LU17, LU4, LU10, LU2, LU20 dan LU3 mampu menstabilkan kompleks selama simulasi 100 ns, dilihat dari nilai RMSD <2Å, nilai RMSF yang memiliki sisi aktif yang berada pada fluktuasi yang rendah, memiliki energi total (MMGBSA) berturut-turut adalah -38,4867 kkal/mol ; -38,2561 kkal/mol; -37,5491 kkal/mol; -36,5463 kkal/mol; -36,3619 kkal/mol; 34,7198 kkal/mol; -31,5084 kkal/mol; -30,6727 kkal/mol; -30,5801 kkal/mol; -26,9043 kkal/mol. dan memiliki nilai okupansi berturut turut 99,79%, 99,26%, 87,71%, 74,22%, 66,99%, 66,76%, 65,58%. 65,13%, 53,54% dan 51,31%.

6.2 Saran

1. Melakukan studi prediksi toksisitas secara *in silico* terhadap parameter uji lainnya pada senyawa turunan flavonoid.
2. Melakukan pengujian terhadap senyawa terbaik yaitu LU90 menggunakan uji In vitro dan In Vivo untuk meyakinkan sebagai kandidat obat baru pada kanker payudara.