

BAB VI. SIMPULAN DAN SARAN

VI.1 Kesimpulan

1. Model farmakofor terbaik tersusun dari training set 1 dan training set 5 yang memiliki 10 fitur diantaranya, 5 ikatan hidrofobik, 1 donor ikatan hidrogen, dan 4 akseptor ikatan hidrogen.
2. Berdasarkan hasil simulasi penapisan virtual terhadap 270.547 senyawa database ZINC *Natural Product*, diperoleh hits berbasis farmakofor sebanyak 1000 senyawa dan hits berbasis docking sebanyak 224 senyawa yang aktif sebagai inhibitor topoisomerase.
3. Berdasarkan hasil analisis interaksi ligan uji dengan protein, terdapat tiga ligan uji terbaik yaitu senyawa terbaik yang dipilih berdasarkan nilai bebas ikatan, dari kriteria tersebut kandidat senyawa terbaik yaitu senyawa dengan kode ZINC000252515534 ((E)-2-cyano-3-(1,3-dimethyl-2,4-dioxo-pyrimidin-5-yl)-N-[3-(1-piperidylsulfonyl) phenyl] prop-2-enamid) nilai binding energi yaitu -9,7 kkal/mol, ZINC000079216817 ((3S) - 3 - [[4 - [2 - [(8R,9S,10R,13S,14S,17R)-17-acetoxy-10,13-dimethyl- 3 – oxo - 2,6,7,8,9,11,12,14,15,16 - deca) nilai binding energi -8.89 kkal/mol, dan ZINC000085594035 (2R,6R) - 6 - [(3S,5S,10S,12S,13R,14R,17R) – 12 - acetoxy - 3hydroxy - 4,4,10,13,14 - pentamethyl-7,11,15 - trioxo -) dengan nilai binding energi - 8.66 kkal/mol.

VI.2 Saran

Perlu dilakukan penelitian lanjutan dengan metode dinamika molekul terhadap 3 ligan terbaik tersebut untuk melihat dan mengamati kestabilan interaksi supaya dapat dijadikan kandidat obat baru sebagai terapi anti kanker serviks.