

BAB V

SIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

1. Hampir setengah senyawa uji dari Tumbuhan Kesumba (*Bixa Orellana* L.) memenuhi syarat aturan Lipinski sebanyak 24 senyawa tetapi terdapat 27 senyawa uji yang tidak memenuhi syarat. Senyawa A5 (8-Hydroxyluteolin 7-sulfate) memiliki nilai ΔG yang paling rendah yaitu sebesar -9,98 kkal/mol, menunjukkan interaksi yang lebih baik dengan VHR dibandingkan senyawa lainnya dan senyawa pembanding 5-Fluorourasil. Senyawa A5 juga memiliki nilai konstanta inhibisi (K_i) yang paling rendah yaitu 0,04 μM , menunjukkan afinitas ligan-reseptor yang lebih tinggi. Hasil penambatan molekul terbaik berdasarkan nilai ΔG dan K_i terhadap reseptor VHR adalah A4, A5, dan A46.
2. Senyawa uji 4 memiliki struktur yang paling stabil dan kompatibel dengan protein target dibandingkan ligan alami. senyawa uji 5 dan senyawa uji 46 memiliki struktur yang kurang stabil dan kompatibel dengan protein target dibandingkan ligan alami. residu asam amino yang tidak stabil cenderung mengalami banyak perubahan posisi saat simulasi dinamika molekul berlangsung.

Berdasarkan hasil molecular docking dan molecular dynamics simulation, senyawa A5 (8-Hydroxyluteolin 7-sulfate) dan senyawa uji A4 (Luteolin 7-sulfate) memiliki potensi untuk dikembangkan sebagai antikanker serviks. Senyawa tersebut perlu diuji lebih lanjut untuk memastikan keamanannya dan efektivitasnya dalam mengobati kanker serviks.

5.2 Saran

Senyawa A4 dan A5 dari Tumbuhan Kesumba (*Bixa Orellana* L.) memiliki potensi yang menjanjikan sebagai anti kanker serviks berdasarkan hasil penelitian *in silico* ini. Penelitian lebih lanjut diperlukan untuk mengkonfirmasi aktivitas anti kanker serviks senyawa A4 & A5 secara *in vitro* dan *in vivo*.