

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian ini, maka dapat disimpulkan bahwa:

1. Berdasarkan hasil *network pharmacology*, senyawa dari *G. mangostana* L. (catechin, gartanin, alpha-Mangostin, norathyriol, maclurin, 8-deoxygartanin, beta-Mangostin, gamma-Mangostin, garcinone A, garcinone B, dan garcinone D) terhubung dengan protein target kanker paru-paru yang dianggap signifikan yaitu protein Aurora Kinase A (AURKA).
2. Berdasarkan analisis *Gene Ontology* dan KEGG, protein yang signifikan umumnya terasosiasi dengan proses biologi seperti siklus sel dan pembelahan sel. Sementara mekanisme senyawa *G. mangostana* L. terhadap kanker paru-paru yang diprediksi terhubung dengan 4 jalur (siklus sel, meiosis oosit, pematangan oosit yang dimediasi progesteron, protein motorik) yang dianggap dapat menghalangi aktivitas jalur tersebut.
3. *Deep learning molecular docking* menghasilkan hasil afinitas terbaik pada senyawa garcinone D (-10,30 kkal/mol) dan gamma-Mangostin (-10,28 kkal/mol) dibandingkan dengan *native ligand* adenosine-5'-diphosphate (-9,00 kkal/mol).
4. Dalam *molecular dynamics*, didapatkan bahwa senyawa garcinone D dan gamma-Mangostin tidak lebih stabil dibandingkan *native ligand* selama simulasi 50 ns berdasarkan nilai RMSD. Selain itu, ketiga residu asam amino ketiga ligan ini memiliki fluktuasi yang hampir sama pada analisis RMSF dan tidak berfluktuasi pada situs pengikatan protein.

5.2 Saran

Disarankan untuk penelitian selanjutnya melakukan kajian potensi senyawa lain dari *G. mangostana* L. serta melakukan studi *in vitro* dan *in vivo* terhadap efektivitas senyawa garcinone D dan gamma-Mangostin pada reseptor kanker dengan kode PDB 5ORY.