

## BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Nilai sitotoksitas ( $IC_{50}$ ) fraksi-fraksi *A. unguis* terhadap sel kanker T47D menunjukkan fraksi heksana (8,74  $\mu\text{g/mL}$ ) dan etil asetat (7,36  $\mu\text{g/mL}$ ) tergolong kuat, fraksi kloroform (26,43  $\mu\text{g/mL}$ ) tergolong sedang, sedangkan fraksi butanol (103,70  $\mu\text{g/mL}$ ) tergolong lemah. Fraksi etil asetat merupakan fraksi yang paling kuat kemampuan sitotoksiknya. Profil metabolik keempat fraksi dari ekstrak etanol *A. unguis* menunjukkan 222 senyawa yang tergolongan ke dalam metabolit sekunder alkaloid, fenolik dan fenil propanoid, terpenoid, flavonoid, kumarin, serta steroid, dan metabolit primer berupa asam amino, karbohidrat, serta lipid.

Simulasi molekuler *docking* senyawa aktif dari fraksi etil asetat menghasilkan interaksi terbaik antara ligan dengan setiap protein targetnya yakni; isochamaejasmin (EGFR, CDK4, MDM2), flazin (PARP, CDK6, HER2), dan endralazin (AKT) dilihat berdasarkan nilai afinitas pengikatan secara berurutan yaitu; (-7,7983 kkal/mol, -7,2860 kkal/mol, -7,2860 kkal/mol), flazin (-9,7263 kkal/mol, -8,3583 kkal/mol, -9,5643 kkal/mol), (-5,9127 kkal/mol). Mekanisme interaksi kompleks terbaik hasil simulasi *docking* dan MD ditunjukkan oleh pembentukan ikatan hidrogen antara residu asam amino yang sama (Asp867) dari protein HER2 YVMA mutan dengan ligan flazin dengan nilai afinitas pengikatan sebesar -10,1136 kkal/mol. Berdasarkan perbandingan nilai penghambatan dengan senyawa obat sekaligus mekanisme interaksi ligan-protein pada simulasi *docking* dan nilai energi pengikatan MD kompleks, serta didukung hasil studi bioavailabilitas dan farmakokinetiknya, dapat disimpulkan bahwa senyawa flazin berpotensi dikembangkan sebagai kandidat senyawa obat baru berbasis struktur untuk terapi target kanker payudara.

### 5.2 Saran

Terdapat beberapa saran untuk penelitian selanjutnya yaitu melakukan isolasi dan pemurnian senyawa yang berpotensi sebagai kandidat senyawa obat baru, melakukan pengujian lebih lanjut untuk bioaktivitas sitotoksik pada sel kanker payudara lainnya secara *in vitro* maupun *in vivo*, melakukan analisis mekanisme penghambatan terhadap sel kanker pada jalur pensinyalan protein target serta pengkajian lebih dalam potensi senyawa sebagai obat baru untuk *drug discovery*.