

## V KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

1. Dari 38 protein yang diuji dalam molecular docking senyawa rubraxanthone, 14 protein memenuhi kriteria validitas ( $\text{RMSD} < 2 \text{ \AA}$ ), artinya metode yang digunakan valid untuk menguji senyawa rubraxanthone.
2. Hasil molecular docking senyawa rubraxanthone memiliki skor docking yang lebih rendah dibandingkan native ligand sehingga afinitas ikatan rubraxanthone lebih tinggi pada enzim cytochrome 2A6 (Kode PDB: 4EJJ dan 1Z11) daripada native ligand
3. Visualisasi 2D menunjukkan bahwa rubraxanthone memiliki pola interaksi residu asam amino yang sama dengan native ligand pada enzim cytochrome 2A6 (PDB ID: 4EJJ dan 1Z11) serta dapat berikatan dengan active site protein tersebut. Sehingga rubraxanthone diprediksi berpotensi sebagai inhibitor kompetitif enzim CYP2A6 yang dapat menyebabkan interaksi obat-herbal.

### 5.2 Saran

1. Pendekatan komputasi lanjutan seperti molecular dynamics simulation disarankan untuk mengevaluasi kestabilan kompleks ligan-protein secara lebih mendalam.
2. Perlu dilakukan penelitian lanjutan secara in vitro dan in vivo untuk mengonfirmasi hasil prediksi interaksi rubraxanthone terhadap enzim CYP2A6.

