

BAB VI

SIMPULAN DAN SARAN

6.1 Simpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan dari 28 senyawa uji belimbing wuluh yang telah di-*docking* pada reseptor $Er\alpha$ dan $Er\beta$ dapat diambil 3 senyawa utama terbaik yaitu *Trans-geranylgeraniol*, *Methyl trisporate C*, dan *Xanthosine* yang memiliki energi ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (KI) berturut-turut yang lebih rendah yaitu -7.59 kkal/mol dan 2.72 nM; -11.03 kkal/mol dan 8.28 nM; dan -12.11 kkal/mol dan 1.33 nM dari ligan alami pada reseptor $Er\alpha$ -11.41 kkal/mol dan 4.36 nM dan ligan alami reseptor $Er\beta$ -10.08 kkal/mol dan 40.90 nM.

Trans-geranylgeraniol memiliki sifat absorpsi dan distribusi yang baik, tidak bersifat mutagenik dan karsinogen sehingga diprediksi dapat dijadikan pemandu pada pengobatan antikanker payudara dengan target reseptor $Er\alpha$. Namun pada senyawa *Trans-geranylgeraniol* memiliki nilai *cramer rules* yang menunjukkan senyawa tersebut mempunyai toksisitas yang tinggi. Kemudian untuk *Methyl trisporate C* memiliki sifat absorpsi dan distribusi yang kurang baik, tidak bersifat mutagenik dan karsinogen sehingga diprediksi dapat dijadikan obat pemandu pada pengobatan antikanker payudara dengan target reseptor $Er\beta$. Namun pada senyawa *Methyl trisporate C* memiliki nilai *cramer rules* yang menunjukkan senyawa tersebut mempunyai toksisitas menengah. Pada senyawa *Xanthosine* memiliki sifat

absorpsi dan distribusi yang kurang baik, tidak bersifat mutagenik dan karsinogen sehingga diprediksi dapat dijadikan obat pemandu pada pengobatan antikanker payudara dengan target reseptor $Er\beta$. Senyawa *Xanthosine* juga sudah memenuhi semua persyaratan parameter seperti *pre-ADME*, *Lipinski Rule of Five*, dan *Toxtree*, sehingga senyawa *Xanthosine* dapat dijadikan kandidat sebagai pemandu untuk pengobatan kanker payudara.

6.2 Saran

Penelitian ini merupakan prediksi menggunakan perangkat aplikasi sehingga masih perlu dilakukan pengujian baik secara *in vivo* maupun *in vitro* sebagai penunjang agar *Trans-geranylgeraniol*, *Methyl trisporate C*, dan *Xanthosine* dapat dijadikan suatu kandidat obat. Serta perlu juga dilakukan modifikasi struktur pada senyawa *Trans-geranylgeraniol* dan *Methyl trisporate C* agar memiliki nilai toksisitas yang lebih baik