

BAB VI

SIMPULAN DAN SARAN

6.1 Simpulan

Studi *in silico* pada tanaman *Lantana camara* dan *Lantana involucrata* dengan menggunakan 47 senyawa menghasilkan 18 senyawa yang memenuhi aturan *Lipinski rule of five*, 5 senyawa yang menunjukkan profil farmakokinetika yang baik, 30 Senyawa yang dikategorikan aman karena tidak menunjukkan toksik pada prediksi mutagenic, karsinogenik, paparan ambang batas pada manusia, LD₅₀ dan hepatotoksik. Pada simulasi *molecular docking* dihasilkan 12 senyawa yang memiliki nilai ΔG yang lebih rendah dari *native ligan* dan lebih rendah dari ligan pembanding. tiga senyawa terbaik berdasarkan nilai ΔG paling rendah adalah senyawa *Lantanolic acid* dengan nilai ΔG -9,57 kkal/mol, senyawa *Oleanolic acid (3 β -hydroxyolean-12-en-28-oic acid)* dengan nilai ΔG -9,27 kkal/mol, dan senyawa *Ursonic acid (3-oxours-12-en-28-oic acid)* dengan nilai ΔG -9,28 kkal/mol. Senyawa-senyawa memiliki profil distribusi yang kurang baik dan pada senyawa *Oleanolic acid (3 β -hydroxyolean-12-en-28-oic acid)* dan *Lantanolic acid* bersipat toksik terhadap hati. Tetapi ketiga senyawa tersebut berpotensi baik untuk dijadikan kandidat obat antikanker serviks karena memiliki prediksi aktivitas terhadap reseptor MAP3K7 (KODE PDB: 5V5N).

6.2 Saran

Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut pada tanaman *Lantana camara* dan *Lantana involucrate* untuk melihat kestabilan antara ligan dan reseptor yaitu dengan *molecular dynamic*. Selain itu dapat dilakukan sintesis senyawa pada *Lantanolic acid*, *Oleanolic acid (3 β -hydroxyolean-12-en-28-oic acid)* dan *Oleanolic acid (3 β -hydroxyolean-12-en-28-oic acid)* dibuat semirip mungkin sehingga bisa menjadi kandidat antikanker seviks.

