

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

1.1 Kesimpulan

Penelitian terhadap senyawa uji flavonoid pada protein ID: 6COX sebagai inhibitor COX-2 dengan menggunakan metode penambatan molekuler diperoleh hasil energi bebas ikatan (ΔG) senyawa uji terbaik yaitu -9,31 kcal/mol berasal dari senyawa uji flavonoid Epicatechin-3-O-Gallate, - 8,97 kcal/mol dari senyawa uji Gallocatechin dan - 8,83 kcal/mol berasal senyawa uji Tamarixetin. Nilai energi bebas ikatan yang semakin kecil menunjukkan senyawa tersebut berpotensi memiliki aktivitas biologis. Secara keseluruhan semua senyawa terutama tiga senyawa uji flavonoid terbaik yaitu Epicatechin-3-O-Gallate, Gallocatechin dan Tamarixetin memiliki potensi aktivitas sebagai inhibitor COX-2. Interaksi residu asam amino yang berperan dalam terbentuknya ikatan hidrogen paling banyak diperoleh dari residu asam amino SER 535, TYR 385 dengan SER 530 pada senyawa uji dan ARG 120 pada senyawa pembanding serta GLN 192 pada 15 senyawa dengan nilai *docking* tertinggi. Residu asam amino tersebut banyak berkontribusi dalam pembentukan ikatan dan menstabilkan interaksi pengikatan senyawa pada protein COX-2.

1.2 Saran

Pada penelitian ini hanya melakukan penambatan molekuler (*molecular docking*) sebagai screening awal senyawa yang berpotensi menghambat COX-2 dengan kode protein ID: 6COX dan belum dilakukan uji farmakofor di awal sebelum melakukan penambatan. Oleh sebab itu untuk penelitian selanjutnya perlu dilakukan studi farmakofor terlebih dahulu sebagai langkah awal dalam *screening* penghambatan pada COX-2. Hasil dari uji farmakofor tersebut dapat dijadikan sampel pada penambatan molekuler protein target sehingga di dapat senyawa yang mempunyai aktivitas inhibitor COX-2 kuat dengan tingkat validitas analisis interaksi residu asam amino yang tinggi.