

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian dari Studi Penambatan Molekuler Senyawa Metabolit Sekunder Buah Semangka (*Citrullus lanatus*) Yang Berpotensi Sebagai Anti Inflamasi Melalui Inhibisi COX-2 menggunakan program AutoDock dapat ditarik kesimpulan sebagai berikut:

1. Hasil energi bebas ikatan (ΔG) senyawa uji terbaik yaitu -8,62 kcal/mol berasal dari senyawa uji myricetin, -8,53 kcal/mol dari senyawa uji tricetin dan -8,32 kcal/mol berasal senyawa uji quercetin. Secara keseluruhan semua senyawa terutama tiga senyawa uji flavonoid terbaik yaitu myricetin, tricetin dan quercetin memiliki potensi aktivitas sebagai inhibitor COX-2.
2. Diperoleh residu asam amino pada protein reseptor yang memiliki peran besar dalam pembentukan ikatan hidrogen dengan ligan senyawa uji yaitu GLN 192 yang memiliki 14 ikatan kemudian PHE 518 yang memiliki 13 ikatan dan LEU 352 memiliki 7 ikatan. Residu asam amino tersebut banyak berkontribusi dalam pembentukan ikatan dan menstabilkan interaksi pengikatan senyawa pada protein COX-2.

5.2 Saran

Dalam penelitian selanjutnya disarankan untuk dilakukan studi farmakofor terlebih dahulu sebagai langkah awal dalam *screening* penghambatan pada COX-2. Hasil dari uji farmakofor tersebut dapat dijadikan sampel pada penambatan molekul protein target sehingga di dapat senyawa yang mempunyai aktivitas inhibitor COX-2 kuat dengan tingkat validitas analisis interaksi residu asam amino yang tinggi. selain itu pada penelitian ini senyawa yang diuji hanya 16 senyawa dari buah semangka, sedangkan di dalam tumbuhan tersebut masih banyak terdapat senyawa lain yang mungkin memiliki potensi lebih baik sebagai inhibitor COX-2.