

V. KESIMPULAN

5.1 Kesimpulan

Adapun kesimpulan dari penelitian yang telah dilakukan yaitu:

1. Toksisitas senyawa bioaktif yang terdapat dalam daun ciplukan telah dianalisis menggunakan Protox, pkCSM, dan lima aturan Lipinski terhadap 45 senyawa bioaktif. Hasil analisis menunjukkan bahwa hanya satu senyawa, yaitu oxowithanolide, yang memiliki tingkat toksisitas paling baik dibandingkan dengan senyawa lainnya. Selain itu, Oxowithanolide juga berhasil lulus aturan Lipinski, yang menandakan bahwa senyawa ini memiliki karakteristik farmakokinetik yang baik, seperti kelarutan dan permeabilitas yang optimal untuk dikembangkan sebagai kandidat obat. Dibandingkan dengan 32 senyawa lainnya, oxowithanolide menunjukkan profil yang lebih unggul dalam hal toksisitas dan kelayakan sebagai obat, sehingga memiliki potensi yang lebih besar sebagai agen terapi kanker.
2. Melalui analisis *Maximal Clique Centrality* (MCC), diperoleh 4 target protein utama yang memiliki potensi interaksi tinggi dengan oxowithanolide. Hal ini mengindikasikan bahwa senyawa ini dapat berperan aktif dalam mekanisme penghambatan kanker payudara melalui interaksi dengan target-target biologis yang relevan.
3. aktivitas anti-kanker senyawa oxowithanolide terhadap 4 reseptor menghasilkan nilai energi bebas pengikatan yang terbaik pada reseptor *STAT-3* sebesar -8.6 kkal/mol, *NFKB-1* sebesar -9.7 kkal/mol, *HIF1- α* sebesar -7.3 kkal/mol dan *HDAC1* sebesar -7.8 kkal/mol.
4. Kompleks *NFKB-1* dan Ligan Uji mengalami stabilisasi setelah sekitar 50 ps, karena tidak ada peningkatan drastis yang menunjukkan ketidakstabilan struktural. Fluktuasi kecil yang terlihat setelah 60 ps menunjukkan adanya perubahan yang wajar terjadi terutama jika molekul memiliki fleksibilitas alami, sedangkan untuk nilai RMSF juga didapatkan relatif rendah yaitu dibawah 2Å yang menunjukkan bahwa sebagian besar struktur tetap stabil selama simulasi.

5.2 Saran

Hasil ini merupakan hasil dari uji secara *in silico* perlu dilakukan uji terlebih lanjut yaitu *in vitro* dan *in vivo* untuk mengetahui aktivitas senyawa tersebut.