

BAB V

PENUTUP

A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka diperoleh simpulan bahwa:

1. Analisis HKSA senyawa turunan biflavonoid dengan menggunakan metode semiempiris AM1 memperoleh hasil persamaan terbaik, yaitu:
$$\text{Log } 1/\text{IC}_{50} = (-10,086) - (2,708 \cdot \text{AM_LUMO}) + (0,144 \cdot \text{Log } S) + (0,044 \cdot \text{Vsa}) - (0,029 \cdot \text{vol})$$
2. Deskriptor yang berpengaruh terhadap aktivitas senyawa adalah energi LUMO (AM_LUMO), kelarutan (logS), volume molekul (vol), dan luas permukaan Van der Waals (VSA), dengan penjelasan bahwa peningkatan logS dan VSA akan memperbesar nilai IC₅₀ dan menurunkan aktivitas antiproliferasi. Sebaliknya, peningkatan E_{LUMO} dan vol akan memperkecil nilai IC₅₀ dan meningkatkan pula aktivitas antiproliferasinya.
3. Sebanyak 12 senyawa baru dengan kode S13D, S13H, S13I, S13J, S13K, S13L, S13M, S13N, S13O, S13P, S13Q, dan S13R memiliki aktivitas (log 1/IC₅₀) yang lebih baik dibandingkan senyawa penuntunnya.
4. Beberapa senyawa baru turunan biflavonoid memiliki sifat farmakokinetik yang lebih baik dibandingkan senyawa penuntun sesuai dengan mekanisme ADME yang diujikan. Senyawa yang dapat dipertimbangkan untuk dikembangkan lebih lanjut yaitu S13L dan S13O.

B. Saran

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, perlu diketahui bahwa aktivitas antiproliferasi sel kanker A549 yang diperoleh merupakan prediksi yang didasarkan pada sifat fisika kimia suatu senyawa, sehingga diperlukan penelitian lebih lanjut melalui uji secara *in silico* (docking molekuler) untuk mengetahui senyawa dengan interaksi yang baik terhadap ligan yang dituju untuk selanjutnya dapat dilakukan proses sintesis dan dilanjutkan dengan pengujian *in vitro/in vivo* terhadap turunan biflavonoid yang memiliki prediksi aktivitas yang baik.