

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Senyawa flavonoid terprenilasi berpotensi untuk berinteraksi dengan protein ALK dan RET pada NSCLC berdasarkan nilai *binding affinity* secara *in silico*. Hasil skrining drug likeness dan toksisitas terhadap 1036 senyawa flavonoid terprenilasi, diperoleh enam senyawa kandidat terbaik, yaitu senyawa xanthoangelol D, derricidine, xanthoangelol J, lespeol, TB2, dan TB3. Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa keenam senyawa tersebut secara prediktif memiliki afinitas pengikatan yang lebih kuat terhadap protein RET dibandingkan ALK. Nilai *binding affinity* keenam senyawa terhadap protein RET berkisar antara -7,7 hingga -9,3 kkal/mol, yang menunjukkan pengikatan lebih baik dibandingkan kontrol positifnya dengan nilai -5,8 kkal/mol.

B. Saran

Interaksi senyawa terpilih dengan protein targetnya perlu dilakukan simulasi dinamika molekuler untuk mengevaluasi kestabilan interaksi ligan-protein secara lebih mendalam, serta perlu dilakukan juga uji *in vitro* dan *in vivo* untuk memvalidasi aktivitas penghambatan secara biologis, sehingga potensi senyawa sebagai kandidat obat antikanker pada NSCLC dapat ditentukan dengan lebih komprehensif.