

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian mengenai potensi herba Sempretan (*Mikania cordata*) sebagai terapi disfungsi ereksi menggunakan integrasi metode network pharmacology dan molecular docking, maka dapat ditarik kesimpulan sebagai berikut:

1. Analisis kromatografi menggunakan Liquid Chromatography-High Resolution Mass Spectrometry (LC-HRMS) yang diintegrasikan dengan Principal Component Analysis (PCA) berhasil mengidentifikasi komponen fitokimia dominan pada ekstrak herba *Mikania cordata*, di mana senyawa Adenosine, Kaempferol, Ursolic acid, α -Linolenic acid, dan Betulin terpilih sebagai marker potensial melalui studi penelusuran literatur. Berdasarkan penapisan sifat drug-likeness, mayoritas senyawa kandidat memenuhi kriteria Lipinski's Rule of Five, yang mengindikasikan kemampuan permeabilitas membran dan bioavailabilitas yang optimal sebagai sediaan oral.
2. Pendekatan network pharmacology berhasil memetakan mekanisme kerja multikomponen dan multitarget dari *Mikania cordata* melalui identifikasi 27 protein target irisan yang memiliki relevansi klinis langsung dengan patofisiologi disfungsi ereksi. Berdasarkan analisis pengayaan jalur KEGG (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes), herba ini bekerja secara sistemik meregulasi jalur persinyalan cGMP-PKG dan Relaxin melalui

modulasi positif sumbu Akt/eNOS untuk meningkatkan produksi Nitric Oxide (NO) di hulu, serta modulasi negatif pada PDE5A untuk menjaga stabilitas kadar cGMP di hilir.

3. Simulasi penambatan molekuler (molecular docking) membuktikan bahwa senyawa Kaempferol memiliki afinitas ikatan tertinggi dan paling stabil, ditandai dengan nilai energi bebas ikatan (ΔG) yang kompetitif bahkan melampaui kontrol positif Sildenafil pada isoform Nitric Oxide Synthase (nNOS = -10.1 kkal/mol; eNOS = -10.4 kkal/mol; iNOS = -11 kkal/mol) dan AKT1 (-10.2 kkal/mol). Visualisasi interaksi menunjukkan terjadinya konservasi residu asam amino kunci aromatik dan hidrofobik yang identik dengan ligan alami (native ligand), sehingga mengonfirmasi validitas profil farmakofor senyawa tersebut.

B. Saran

1. Penerapan Simulasi Dinamika Molekular (Molecular Dynamics Simulation): Mengingat metode molecular docking dalam penelitian ini terbatas pada pengamatan konformasi statis, disarankan untuk melanjutkan analisis pada senyawa marker potensial (khususnya Kaempferol) menggunakan simulasi dinamika molekuler (Molecular Dynamics). Hal ini diperlukan untuk mengevaluasi parameter termodinamika kompleks ligan-protein secara dinamis berdasarkan fungsi waktu, fluktuasi struktur (RMSD/RMSF), serta stabilitas ikatan hidrogen dalam lingkungan pelarut yang menyerupai kondisi fisiologis tubuh sesungguhnya.

2. Validasi Eksperimental secara In Vitro dan In Vivo: Perlu dilakukan pengujian laboratorium berbasis bukti (evidence-based) untuk memvalidasi hasil prediksi teoretis ini, seperti uji penghambatan aktivitas enzim PDE5A secara in vitro menggunakan kit esai spesifik, serta uji efikasi afrodisiak secara in vivo pada hewan model disfungsi ereksi guna mengamati parameter pemulihan hemodinamika korpus kavernosum secara riil.
3. Analisis Toksisitas Eksperimental Lebih Lanjut: Mengingat hasil penapisan teoretis berbasis komputasi menunjukkan senyawa Adenosine berada pada Kelas 2 (LD50 8 mg/kg), perlu dilakukan uji toksisitas akut dan subkronis secara eksperimental di laboratorium guna menetapkan batas margin keamanan (safety margin) dari ekstrak herba *Mikania cordata* sebelum dikembangkan menjadi sediaan fitofarmaka.