

BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Penelitian berbasis bionformatika yang dilakukan menunjukkan bahwa *A. paniculata* dapat dijadikan obat antikanker payudara. Hal tersebut dapat dilihat dari sepuluh hasil target potential yang diperkirakan dapat digunakan sebagai target ikatan senyawa untuk obat antikanker yaitu, TP53, STAT3, MAPK3, SRC, AKT1, EGFR, HSP90AA1, MAPK1, CTNNB1, dan HRAS. Dua dari sepuluh target potential yaitu, MAPK3 dan AKT1 digunakan dalam simulasi docking dengan 21 senyawa uji. Penambatan senyawa 18 (paniculogenin) terhadap kedua target reseptor menghasilkan energi ikatan terendah jika dibandingkan dengan senyawa lain dan ligan natifnya yaitu -14.2 kkal/mol terhadap MAPK3 dengan ligan natif -6.0 kkal/mol dan -18.3 kkal/mol terhadap AKT1 dengan ligan natif -14.2 kkal/mol. Kedua reseptor tersebut berperan dalam pensinyalan kinase sehingga senyawa 18 berguna sebagai inhibitorynya.

B. Saran

Hasil penelitian ini dapat digunakan sebagai data untuk dilakukannya penelitian lanjutan seperti molekuler dinamik untuk mengetahui stabilitas interaksi yang terjadi antara protein dan ligan.