

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Studi *in silico* dan dinamika molekuler dapat menggambarkan potensi senyawa bioaktif bidara laut (*Strychnos nux-vomica*) yang menghambat perkembangan kanker payudara jalur PI3K/AKT.

1. Senyawa bioaktif bidara laut dapat menargetkan protein AKT1, sehingga berpotensi menurunkan proliferasi sel, migrasi sel, angiogenesis, dan metastasis, serta meningkatkan efek apoptosis.
2. Senyawa bioaktif bidara laut secara umum memiliki profil farmakokinetik yang baik.
3. Senyawa bioaktif bidara laut memenuhi aturan Lipinski, sehingga berpotensi sebagai obat.
4. Senyawa bioaktif bidara laut dapat menghambat protein AKT1 baik pada sisi aktif maupun alosterik.
5. Stabilitas interaksi senyawa bioaktif bidara laut dengan AKT1 masih menunjukkan hasil yang kurang baik karena adanya keterbatasan alat yang digunakan sehingga waktu simulasi yang digunakan hanya 5 ns.

B. Saran

Hasil yang diperoleh dari penelitian *in silico* dan dinamika molekuler senyawa bioaktif bidara laut masih memerlukan evaluasi lebih lanjut. Evaluasi tersebut dapat dilakukan dengan menggunakan *software* atau modifikasi parameter yang digunakan dalam studi *in silico* dan dinamika molekuler. Selain itu, perlunya penambahan waktu dan penggunaan alat dengan spesifikasi yang lebih memadai untuk simulasi dinamika molekuler. Penelitian secara *in vitro* dan *in vivo* juga dapat dilakukan untuk memvalidasi hasil penelitian *in silico* yang dilakukan.