

BAB V

PENUTUP

5.1.Simpulan

Semua senyawa Physalin memiliki afinitas yang tinggi terhadap AKT1 dan ERK2. Physalin F memiliki afinitas yang baik terhadap PSMB5. Senyawa physalin berada pada situs aktif protein. Senyawa physalin membentuk interaksi intramolekuler dengan residu asam amino penting AKT1, ERK2, dan PSMB5. Berdasarkan data penambatan AKT1, ERK2, dan PSMB5 merupakan target biologis senyawa physalin. Physalin menghambat kerja protein AKT, ERK2 dengan melekat kuat pada situs aktif. Efek antikanker Physalin disebabkan oleh penghambatan AKT1, ERK2, dan PSMB5.

5.2.Implikasi

Karena diprediksi physalin memiliki afinitas yang tinggi terhadap AKT1, ERK2, dan PSMB5, hal ini memperkecil lingkup pengujian yang selanjutnya dilakukan dalam memahami mekanisme aksi Physalin. Pengujian *in vitro* Physalin yang selanjutnya dapat dilakukan terfokus pada AKT1, ERK2, dan PSMB5. Lalu karena physalin diprediksi dapat menghambat AKT1, Physalin berpotensi digunakan pada pasien kanker payudara, ovarium, prostat dan kanker lain mengalami hiperaktivasi AKT1. Pencarian atau pembuatan senyawa yang memiliki struktur serupa physalin atau fitosterol lainnya dapat dilakukan dalam mengembangkan inhibitor AKT1, ERK2, atau PSMB5. Physalin diprediksi dapat dimanfaatkan juga berkaitan dengan resisten beberapa jenis sel kanker terhadap obat kemoterapi. Karena Physalin dapat mempengaruhi ekspresi BCL2 melalui modulasi NF κ B, Physalin berpotensi dikombinasikan dengan obat kemoterapi sitotoksik untuk meningkatkan efek terapeutik yang dimilikinya.

5.3.Saran dan Rekomendasi

Walaupun sering digunakan dalam penanpisan virtual penambatan molekuler memiliki berbagai keterbatasan. Penambatan molekuler dapat memodelkan konformasi yang tidak dapat terjadi pada reseptor akibat rongga yang sebenarnya tidak dapat diakses suatu ligan. Selain itu penambatan dilakukan dengan reseptor dianggap kaku. Protein diketahui merupakan molekul yang sangat dinamis. Pengikatan ligan pada dapat mengakibatkan perubahan konformasi protein. Sangat disarankan hasil penelitian ini dilakukan analisis lanjutan menggunakan simulasi dinamika molekuler. Hasil yang dihasilkan penambatan molekuler merupakan prediksi dan tidak dapat sepenuhnya menggantikan pengujian secara *in vitro*, sehingga pengujian *in vitro* sangat direkomendasikan.