

## BAB 6 PENUTUP

### 6.1 Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan terhadap ekstrak kulit pohon andalas (*Morus macroura* Miq.) untuk mengetahui potensinya sebagai agen antikanker payudara melalui pendekatan *in silico* berbasis *network pharmacology* dan *molecular docking*, didapatkan hasil sebagai berikut:

- 1) Senyawa bioaktif golongan fenolik teridentifikasi sebagai golongan yang paling dominan dari kulit pohon andalas (*Morus macroura* Miq.). Setelah diseleksi bertahap berdasarkan kriteria *drug-likeness*, profil farmakokinetik, toksisitas, dan prediksi aktivitas biologis, diperoleh senyawa-senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai kandidat agen antikanker payudara.
- 2) Analisis *network pharmacology* mengidentifikasi target protein yang berperan dalam mekanisme kerja senyawa bioaktif terhadap kanker payudara, dengan STAT3, CTNNB1, AKT1, KRAS, EGFR, BCL2, SRC, HIF1A, ERBB2, dan PIK3CA sebagai *hub gene* konektivitas tertinggi. Ketiga jalur sinyal paling signifikan yang teridentifikasi adalah *EGFR tyrosine kinase inhibitor resistance*, *Proteoglycans in cancer*, dan *Endocrine resistance*, yang seluruhnya berkaitan erat dengan mekanisme proliferasi, invasi, dan resistensi terapi pada kanker payudara.
- 3) *Molecular docking* menunjukkan senyawa bioaktif mampu berikatan dengan reseptor STAT3, CTNNB1, dan AKT1 dengan validitas metode yang terpenuhi. Macrourone C menunjukkan afinitas ikatan terkuat pada STAT3 dan AKT1, sedangkan Sorocein A pada CTNNB1, dengan afinitas lebih kuat dibanding obat pembanding dan pola interaksi residu yang serupa dengan *native ligand*, sehingga berpotensi memiliki mekanisme penghambatan yang sebanding.

### 6.2 Saran

- 1) Perlu dilakukan penelitian lanjutan secara *in vitro*, misalnya uji sitotoksitas pada kultur sel kanker payudara, serta *in vivo* untuk memvalidasi aktivitas antikanker senyawa yang telah diprediksi.

- 2) Perlu dilakukan simulasi dinamika molekul (*molecular dynamics*) untuk mengevaluasi kestabilan interaksi ligan-reseptor dalam kondisi yang lebih mendekati sistem biologis sesungguhnya.
- 3) Perlu digunakan atau dibandingkan beberapa *database network pharmacology* tambahan untuk memperkaya dan memvalidasi data target protein serta jalur sinyal yang diperoleh.
- 4) Perlu dilakukan uji toksisitas secara laboratorium untuk mengonfirmasi hasil prediksi ADMET dan toksisitas yang diperoleh secara komputasi.

