

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

1. Hasil afinitas dan interaksi dari penambatan ligan uji metabolit *Ulva Lactuca* pada sisi aktif reseptor AKT1 (PDB ID: 3MVH) menghasilkan tiga ligan uji terbaik yaitu S24, S64 dan S92. Ligan ini mendekati nilai afinitas ligan alami WFE dan pembanding MK-2206 dengan perolehan ΔG berturut-turut (-8,09), (-7,79) dan (-7,83) kkal/mol dan nilai K_i berturut-turut 1,18; 1,94; dan 1,83 μM .
2. Hasil stabilitas dan interaksi senyawa dari simulasi dinamika molekuler kompleks S24, S64 dan S92 terhadap 3MVH menunjukkan potensi sebagai kandidat inhibitor AKT1 lebih baik dari pada ligan alami dan ligan pembanding. Pada penelitian ini, diantara berapa parameter dinamika molekuler maka disimpulkan ligan S24 menjadi kandidat ligan yang baik dan stabil.

5.2. Saran

Penelitian ini dapat menjadi awalan dalam perkembangan lebih lanjut desain kandidat ligan dengan aktivitas inhibitor AKT1 antikanker usus besar yang berasal dari komponen metabolit sekunder *Ulva lactuca*. Analisis lebih lanjut seperti penelitian *in vitro* maupun *in vivo*, diperlukan untuk mendukung dan memperkuat potensi ligan S24 sebagai kandidat obat.