

BAB VII

KESIMPULAN DAN SARAN

7.1 Kesimpulan

1. Hasil validasi *docking* ligan alami mendapatkan hasil RMSD 1,639 Å. Terdapat 12 senyawa uji yang dilakukan proses *docking*. Dari 12 senyawa uji tersebut terdapat 6 senyawa uji yaitu senyawa uji 8, senyawa uji 5, senyawa uji 3, senyawa uji 9, senyawa uji 7 dan senyawa uji 11 memiliki (ΔG) yang terendah dan didapatkan nilai bebas ikatan (ΔG) yakni -37,739, -36,903, -36,861, -35,815, dan 35,062, -34,476. Senyawa 8 memiliki hasil nilai bebas ikatan (ΔG) *docking* paling baik dengan nilai konstanta inhibisinya.
2. Hasil analisa dinamika molekular menunjukan interaksi yang stabil antara senyawa uji dengan reseptor Bcl-2 dengan nilai ΔG pengikatan yang paling baik dimiliki senyawa 8 dengan nilai -147,749 Kj/mol.
3. Hasil sifat toksisitas pada senyawa uji 8 yang di prediksi stabil sebagai inhibitor Bcl-2 adalah mutagen, positif karsinogenik , dan resiko tinggi pada hERG.

7.2 **Saran**

1. Waktu analisis dalam simulasi dinamika molekular dapat diperpanjang hingga 100 nanodetik untuk mendapatkan data stabilitas interaksi ikatan yang lebih lengkap.
2. Dapat dilakukan dinamika molekular terhadap senyawa uji lainnya untuk melihat stabilitas senyawa uji lainnya.