

BAB VII

KESIMPULAN DAN SARAN

VII.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian yang telah dilakukan maka didapatkan kesimpulan sebagai berikut:

1. Hasil docking dari 10 senyawa uji didapat nilai energi bebas terbaik yaitu senyawa xanthone 8 dengan nilai energi bebas sebesar 6,55 kkal/mol senyawa xanthone 8 pun memiliki nilai konstanta inhibisi sebesar 15,90 μ m.
2. Dari hasil analisa molekul dinamik selama 50 nano detik, dapat dilihat keadaan protein saat terkompleks dengan senyawa xanthone 3 dengan nilai ΔG total sebesar $-22,4636$ adalah yang paling stabil di bandingkan senyawa lainnya.

VII.2 Saran

Adapun saran- saran di bawah ini:

1. Waktu analisis dalam simulasi dinamika molekul perlu diperpanjang untuk mendapatkan data yang lebih lengkap sehingga analisis dapat dilakukan lebih mendalam lagi.
2. Menambahkan ligan uji dalam simulasi dinamika molekul untuk mendapatkan data lebih banyak lagi.