

BAB VII. KESIMPULAN DAN SARAN

VII.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil *docking* senyawa uji terbaik diperoleh senyawa ZINC12560456 dengan nilai ΔG sebesar -10,50 kkal/mol dan nilai K_i sebesar 20,18 nM. Kemudian dilanjutkan dengan simulasi dinamika molekul dimana senyawa ZINC12560456 memiliki kestabilan paling baik ditunjukkan dengan grafik RMSD yang konstan dan stabil serta energi bebas ikatan terkecil berdasarkan analisis MM/PBSA dan MM/GBSA yaitu -58,593 kkal/mol. Terakhir, berdasarkan hasil prediksi toksisitas, senyawa ZINC12560456 diprediksi bersifat non-mutagen, tidak bersifat karsinogenik dan memiliki risiko medium pada kardiotoksitas. Disimpulkan bahwa senyawa ZINC12560456 dapat dijadikan sebagai kandidat senyawa yang berpotensi sebagai antagonis reseptor adenosin A_{2A} pada terapi Parkinson.

VII.2. Saran

1. Perlu dilakukan prediksi toksisitas secara komputasi terhadap parameter uji lainnya.
2. Perlu dilakukan prediksi ADME terhadap kandidat senyawa uji terbaik untuk menentukan rute pemberian obat sebelum disintetis.
3. Dapat dilanjutkan studi HSA (Hubungan Struktur Aktivitas) terhadap senyawa ZINC12560456 untuk memperbaiki permeabilitas senyawa dan menurunkan toksisitasnya.