

## BAB VI. SIMPULAN DAN SARAN

### VI.1. Kesimpulan

1. Berdasarkan proses *pharmacophore modeling* didapatkan hasil 147 senyawa obat yang berpotensi aktif. Kemudian dilakukan *virtual screening* kembali melalui *molecular docking* berdasarkan nilai energi bebas ikatannya menggunakan *vina wizard*, didapatkan 60 senyawa dan untuk hasil yang lebih baik dilakukan *docking* kembali menggunakan *autodock wizard* menghasilkan 2 senyawa.
2. Kedua senyawa memiliki kode ZINC01789051 dan ZINC01789052 dengan ikatan hidrogen yang berikatan dengan residu asam amino Gln776. Berdasarkan interaksi dari 2 kandidat hits, kedua senyawa kandidat memiliki potensi lebih rendah daripada ligan alami karena nilai *binding energy* dan konstanta inhibisinya nya lebih tinggi.

### VI.2. Saran

Untuk mendapatkan hasil yang lebih baik aktif set yang dipilih memiliki struktur yang bervariasi agar senyawa yang terskrining dapat lebih selektif. Dan pemilihan ligan alami yang sangat selektif.