

BAB VI. KESIMPULAN DAN SARAN

VI.1 Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa:

1. Berdasarkan skrining terhadap enzim integrase HIV-1 menggunakan *Pharmacophore modeling* diperoleh 9.276 senyawa yang berpotensi aktif. Kemudian dilakukan skrining kembali melalui prediksi ADMET dan Lipinski's rule of five diperoleh 7 senyawa yang lolos prediksi ADMET dan juga Lipinski's rule of five.
2. Dari 7 senyawa diperoleh 1 senyawa uji terbaik yang dapat menghambat enzim integrase HIV-1 yaitu senyawa dengan kode ZINC84154372 yang memiliki nilai energi ikatan bebas Gibbs (ΔG) sebesar -7.75 kcal/mol dan konstanta inhibisi (K_i) sebesar 2.75 μ M dan memiliki ikatan hidrogen yang berikatan dengan residu asam amino yaitu LYS188 dan HIS183.

VI. 2 Saran

Dari hasil yang diperoleh didapat 1 senyawa uji terbaik yang dapat dilanjutkan dengan melakukan simulasi lanjutan yaitu *molecular dynamic* untuk melihat kestabilan senyawa pada protein target didalam tubuh.