

BAB VI

KESIMPULAN DAN SARAN

6.1 Kesimpulan

1. Hasil penambatan molekul dari 20 senyawa uji terhadap protein target 2QV4 memiliki afinitas yang baik dilihat dari nilai K_i dan ΔG mendekati ligan alami yaitu -10,66 dan 0.01532 μm . Senyawa tersebut meliputi SU32, SU34 dan SU33 dengan nilai K_i dan ΔG berturut-turut adalah -8,92 kkal/mol dan 2,28 μm ; -8,63 kkal/mol dan 0,47 μm ; dan -8,35 kkal/mol & 0,75 μm .
2. Kestabilan interaksi pada senyawa SU32, SU34 dan SU33 selama simulasi 100 ns ditunjukkan dengan parameter RMSD nilai dibawah $<2\text{\AA}$ dan nilai RMSF sisi aktif yang berada di daerah fluktuasi yang rendah serta memiliki nilai ΔTOTAL energi MMGBSA secara berturut-turut yaitu -26.52 kkal/mol, -21,43 kkal/mol, -27,48 kkal/mol.

6.2 Saran

Untuk pengembangan lebih lanjut, dapat dilakukan pengujian secara *in vitro* dan *in vivo* pada analog SU32 dan SU33 untuk memungkinkan diperolehnya senyawa baru yang berpotensi sebagai Antidiabetes