

BAB 6. KESIMPULAN DAN SARAN

6.1. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang dilakukan dapat disimpulkan:

1. Berdasarkan hasil penambatan molekul terhadap 20 senyawa uji, diperoleh 3 senyawa terbaik yaitu S03, S09, S11 dengan nilai ΔG dan K_i yang berinteraksi terhadap enzim alfa-glukosidase.
2. Hasil analisis simulasi dinamika molekul, berdasarkan nilai RMSD didapatkan 2 senyawa kompleks mempertahankan posisi selama 100 ns dan 1 senyawa kurang kompleks. Secara RMSF, ketiga kompleks menunjukkan nilai fluktuasi yang stabil. Nilai MMGBSA menunjukkan nilai yang paling negatif yaitu S11 dengan nilai $\Delta G = -27,48$ kkal/mol. Sehingga, S11 berpotensi untuk menjadi kandidat senyawa pemandu.

6.2. Saran

1. Diperlukan penelitian lebih lanjut untuk melihat toksisitas secara *in silico* terhadap senyawa uji terbaik hasil dinamika molekul
2. Untuk pengembangan lebih lanjut, dapat dilakukan pengujian *in vivo* dan *in vitro* untuk memungkinkan diperolehnya senyawa baru yang lebih berpotensi sebagai senyawa pemandu antidiabetes.
3. Perlu dilakukan analisis MMPBSA untuk mengetahui perbedaan energi sebelum dan sesudah simulasi dinamika molekul.