

BAB VI

KESIMPULAN DAN SARAN

6.1. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang dilakukan dapat disimpulkan:

1. Berdasarkan hasil penambatan molekul terhadap 25 senyawa uji, diperoleh 3 senyawa terbaik dengan nilai ΔG dan K_i yang berinteraksi terhadap reseptor estrogen alfa ($ER-\alpha$), yaitu ligan uji dengan kode S5, S9, dan S23, dengan nilai ΔG berturut-turut yaitu -9,28, -8,31, dan -8,11 kkal/mol.
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 S23 dengan nilai $\Delta G = -32,41$ kkal/mol. Sehingga, S23 berpotensi untuk menjadi kandidat senyaa pemandu.

6.2. Saran

Untuk pengembangan lebih lanjut, dapat dilakukan pengujian in vivo dan in vitro untuk memungkinkan diperolehnya senyawa baru yang lebih berpotensi sebagai senyawa pemandu antikanker payudara.