

BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN

6.1 Kesimpulan

- Berdasarkan afinitas dan interaksi senyawa dari *Myristica fragrans* Nilai energi bebas ikatan (ΔG) hasil simulasi docking diperoleh 5 senyawa dengan afinitas dan interaksi terbaik yaitu malaricone C karena mempunyai nilai energi bebas ikatan (ΔG) dan konstanta inihibisi (K_i) yang paling rendah dibandingkan ligan alami yaitu -8.55 kcal/mol dan 544,95 nm.
- Hasil simulasi dinamika molekul selama 10 ns menunjukkan bahwa Ligan uji yang nilainya lebih baik dari ligan uji lainnya adalah LU39 (Myrcene) dengan nilai rata-rata 0,5297 – 0,4802 Å dan LU30 (Isoboldine) dengan nilai rata-rata 0,8578 – 0,563 Å.

6.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan saran yang dapat di berikan, yaitu:

1. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut terhadap senyawa – senyawa uji terbaik untuk melihat toksisitas secara *in silico*
2. Penelitian lebih lanjut diperlukan secara *in vitro* dan *in vivo* untuk selanjutnya senyawa ini dilakukan secara klinis.