

KESIMPULAN

1. Hasil docking senyawa uji terbaik dimiliki oleh Senyawa 4 dengan binding affinity -6,3 kcal/mol dan kekuatan inhibisi 24,09 mikromolar. Namun hasil parameter docking masih dibawah ligand alami yang memiliki binding affinity -7,87 kcal/mol, nilai K_i 1,69 mikromolar.
2. S4 berikatan hidrogen pada target residu asam amino Tyr547 dan Glu205. S4 memiliki total ikatan hidrogen sebanyak 9 ikatan (5 akseptor & 4 donor).