

BAB VII KESIMPULAN DAN SARAN

VII.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian ini dapat disimpulkan bahwa:

1. Hasil penambatan molekul dari 47 senyawa uji terhadap reseptor AT1, didapatkan interaksi dan afinitas tidak ada yang lebih negatif dari ligan alami. Namun ada lima senyawa uji yang nilainya mendekati ligan alami yaitu L12, L45, L47, L25, dan L21 dengan nilai K_i & ΔG berturut-turut adalah -10,79 kkal/mol & 0,01228 μm ; -10,30 kkal/mol & 0,02828 μm ; -10,01 kkal/mol & 0,04622 μm ; -9,59 kkal/mol & 0,09286 μm ; dan -9,18 kkal/mol & 1,3694 μm .
2. Hasil analisis dinamika molekul pada senyawa L12, L45, L47, L2, dan L21 diperoleh senyawa L12, L25, dan L47 mampu menstabilkan kompleks selama simulasi 100 ns, yang memiliki energi total (MMGBSA) berturut-turut adalah -59,5323 kkal/mol; -37,3584 kkal/mol; dan -59,3395 kkal/mol, dengan nilai okupansi tertinggi 64,23% pada residu Tyr87, dan residu yang memberikan nilai kontribusi penguraian terkecil adalah Arg167.

VII.2 Saran

Untuk pengembangan lebih lanjut, dapat dilakukan pengujian *in vivo* dan *in vitro* pada analog L12, L25, dan L21 untuk memungkinkan diperolehnya senyawa baru yang lebih poten sebagai *Angiotensin II receptor Blockers*.