

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

1. Penelitian ini berhasil mengidentifikasi potensi senyawa aktif dari daun Senggani (*Melastoma malabathricum* L.) sebagai kandidat antihipertensi melalui pendekatan *in silico*. Dari 37 senyawa uji, tiga senyawa terbaik yang memiliki nilai energi bebas ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (Ki) paling rendah terhadap reseptor Angiotensin Converting Enzyme (ACE) adalah DS5, DS20, dan DS34. Ketiga senyawa tersebut menunjukkan afinitas ikatan yang kuat serta berinteraksi dengan residu aktif penting seperti TYR507, HIS337, dan TYR504.
2. Hasil simulasi dinamika molekul menunjukkan bahwa dari ketiga senyawa tersebut, DS5 dan DS34 memiliki kestabilan interaksi terbaik selama 100 ns simulasi dibandingkan ligan alami dan senyawa uji lainnya. Parameter RMSD, RMSF, MMGBSA, dan persentase ikatan hidrogen mendukung bahwa kompleks reseptor-ligan DS5 dan DS34 lebih stabil secara termodinamika. Oleh karena itu, kedua senyawa tersebut memiliki potensi besar untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai inhibitor ACE dan kandidat obat antihipertensi alami.

5.2 Saran

1. Penelitian lanjutan secara eksperimental seperti *in vitro* dan *in vivo* perlu dilakukan untuk mengkonfirmasi aktivitas biologis dari senyawa DS5 dan DS34 terhadap ACE, serta menguji efek farmakologisnya sebagai antihipertensi.
2. Perlu dilakukan analisis toksisitas dan farmakokinetik yang lebih mendalam terhadap senyawa terpilih agar dapat memperkirakan keamanan dan efektivitasnya sebagai kandidat obat.