

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

1. Hasil uji penambatan molekuler menunjukkan bahwa senyawa gamma mangostin memiliki energi ikatan terendah dibandingkan senyawa uji lain yaitu -8,3 kkal/mol tetapi energi ikatan gamma mangostin tidak lebih rendah dari kontrol linsitinib yaitu -9,1 kkal/mol. Hasil visualisasi gamma mangostin menunjukkan terbentuk ikatan hidrogen pada Leu1005.
2. Hasil uji dinamika molekuler adalah gamma mangostin memiliki hasil yang lebih baik dibanding kontrol linsitinib dengan rata-rata RMSD 1,853 Å, rata-rata RMSF 1,196 Å dan RMSF residu yang rendah pada Tyr1251 (0,826 Å), dan Met1079 (1,13 Å). Ikatan hidrogen terbentuk pada sisi pengikatan ATP yaitu Lys1033 dan Met1082. Nilai *binding energy* gamma mangostin lebih rendah dari linsitinib yaitu -42.167,71 kJ/mol.

B. Saran

Perlu dilakukan studi *in silico* lebih lanjut berupa simulasi dinamika molekuler selama 100 ns dengan *snapshot* tiap 100 ps yang dilakukan dua kali untuk setiap kompleks dengan tujuan mendapatkan hasil aktivitas gamma mangostin sebagai inhibitor IGF-1R yang lebih akurat. Selain itu, perlu dilakukan penelitian *in vitro* untuk mengetahui kemampuan penghambatan dari senyawa gamma mangostin terhadap enzim IGF-1R.