

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil *in silico*, senyawa asam maslinat menunjukkan potensi terbaik sebagai inhibitor protein adhesin FimH dibandingkan senyawa uji lainnya. Hasil *molecular docking* menunjukkan asam maslinat memiliki afinitas ikatan terbaik ($-7,6$ kcal/mol) dan membentuk interaksi langsung dengan residu kunci Tyr48, Asp47 dan Asp54 pada *mannose-binding pocket* FimH. Hasil tersebut didukung oleh simulasi *molecular dynamics* yang menunjukkan kompleks FimH–asam maslinat menunjukkan kestabilan struktural yang baik dengan nilai RMSD rata-rata sebesar 1,384 Å. Selain itu, nilai RMSF residu kunci Tyr48 dan Tyr137 masing-masing sebesar 0,608 Å dan 1,104 Å menunjukkan fluktuasi residu yang rendah dan stabil. Dengan demikian, asam maslinat dinyatakan sebagai kandidat inhibitor adhesi FimH paling potensial di antara senyawa uji.

B. Saran

Disarankan agar penelitian selanjutnya dapat melakukan simulasi *molecular dynamics* dengan durasi waktu yang lebih panjang untuk memperoleh gambaran kestabilan dan dinamika interaksi protein–ligan yang lebih komprehensif. Selain itu, diperlukan penelitian lanjutan secara *in vitro* dan *in vivo* untuk memvalidasi hasil prediksi *in silico* terkait aktivitas antiadhesi dan potensi biologis senyawa asam maslinat terhadap protein adhesin FimH.