

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian ini, maka dapat disimpulkan bahwa :

1. *Virtual screening* dan *molecular docking* yang digunakan dapat menemukan senyawa pada database ZINC yang menyerupai *native* ligan yang digunakan.
2. Skor afinitas untuk *native* ligan OKY memiliki nilai -12.52 kcal/mol dan merupakan nilai terendah. Untuk senyawa dari database ZINC, Senyawa 1 memiliki nilai terendah dibanding yang lainnya dengan nilai -11.25 kcal/mol; diikuti dengan Senyawa 6 dengan nilai -10.95 kcal/mol; Senyawa 2 dengan nilai -10.86 kcal/mol; Senyawa 4 dengan nilai -10.74 kcal/mol; Senyawa 5 dengan nilai -10.64 kcal/mol; Senyawa 3 dengan nilai -9.67 kcal/mol; dan Senyawa 7 dengan nilai skor tertinggi yaitu -6.41 kcal/mol; yang diambil dari senyawa ini adalah yang terendah yaitu pada Senyawa 1.
3. Semua senyawa ZINC dapat bereaksi dengan protein-protein pada bakteri *Klebsiella pneumoniae*. Senyawa yang memiliki ikatan dan bereaksi dengan protein yang sama dengan *native* ligan adalah senyawa Senyawa 5.

5.2. Saran

Disarankan untuk penelitian selanjutnya dilakukan studi laboratorium untuk melihat keefektifitasan setiap senyawa terhadap bakteri *Klebsiella pneumoniae*

