BAB V
SIMPULAN DAN ALUR PENELITIAN SELANJUTNYA

5.1 Simpulan

1. Mutasi asam amino pada toksin difteri dilakukan pada residu Ile31 menjadi Lys31 serta Tyr65 menjadi Gln65 (I31K/Y65Q), menghasilkan model struktur dengan persentase asam amino di daerah yang diizinkan pada plot Ramachandran sebesar 95,7%.
2. Interaksi mutan I31K/Y65Q dapat mengurangi afinitasnya terhadap NAD^+, ditandai dengan adanya peningkatan energi ikatan menjadi -5,91 kcal/mol bila dibandingkan dengan energi ikatan pada kontrol *docking* yang mencapai -7,62 kcal/mol.
3. Titik mutasi di posisi residu 31 dan 65 serta asam amino pengganti Lys31 dan Gln65 dapat digunakan dalam pengembangan mutan toksin difteri dengan afinitas rendah terhadap NAD^+

5.2 Alur Penelitian Selanjutnya

Hasil *molecular docking* ini hanya merupakan prediksi awal yang diperoleh secara komputerisasi (bioinformatika) sehingga masih diperlukan pengujian lanjutan, baik melalui uji bioinformatika *molecular dynamic* (MD) maupun secara eksperimental yaitu melalui uji *in vitro* dan *in vivo* di laboratorium.