

BAB V

SIMPULAN DAN ALUR PENELITIAN SELANJUTNYA

5.1 Simpulan

Studi *in silico* ini menggunakan tujuh buah senyawa *xanthone* dari kulit buah manggis sebagai ligan. Senyawa *n-octyl-β-D-glucoside* merupakan senyawa yang digunakan sebagai pembanding karena memiliki aktivitas inhibitor pada bagian *β-OG pocket binder* yang terdapat pada protein *envelope* virus dengue. Studi *molecular docking* bertujuan untuk memprediksikan kekuatan afinitas ligan terhadap protein karena potensi suatu senyawa sebagai ligan dipengaruhi oleh afinitasnya. Dari hasil yang didapat ketujuh senyawa *xanthone* memiliki kemampuan untuk menghambat konformasi protein *envelope* pada virus dengue karena mampu berinteraksi dengan *binding site* dibagian *β-OG pocket binder* yang terdapat pada protein *envelope* virus dengue dan hasil *molecular docking* memperlihatkan bahwa semua ligan *xanthone* tersebut memiliki afinitas dan potensi inhibisi yang cukup baik dengan hasil terbaik senyawa *mangostanol* dan *mangostinone* dengan energi ikatan -8,3 kkal/mol untuk *mangostanol* dan -8,6 kkal/mol untuk *mangostinone*. Terdapat kesesuaian konformasi ligan *mangostanol* dan *mangostinone* dengan *binding site* pada bagian *β-OG pocket binder* yang terdapat pada protein *envelope* virus dengue sehingga dapat bertindak sebagai inhibitor potensial dengan afinitas yang paling baik.

5.2 Alur Penelitian Selanjutnya

Perlu dilakukan analisis HKSA (Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas) untuk mengetahui faktor-faktor yang lebih spesifik dalam struktur molekul ligan yang dapat mempengaruhi afinitas dan aktivitas ligan *xanthone* tersebut sebagai inhibitor potensial pada bagian *β-OG pocket binder* yang terdapat pada protein *envelope* virus dengue. Perlu dilakukan pengujian *in-vitro* untuk mengetahui lebih jelas aktivitas inhibisi dan efek samping dari ligan *xanthone* tersebut.