

BAB V

PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Dengan demikian, dapat disimpulkan beberapa hal dari hasil *molecular docking* dan *molecular dynamics* protein *P. falciparum* terhadap senyawa dari ekstrak kulit batang tumbuhan *A. scholaris*.

- *Molecular docking* menggambarkan adanya ikatan yang kuat antara 100 protein *P. falciparum* terhadap 4 senyawa *A. scholaris*. Hal ini ditunjukkan dari rata-rata hasil *molecular docking* dari seluruh kompleks protein-senyawa yang mencapai -5.99.
- Melalui *molecular dynamics*, ditemukan bahwa kompleks 3UJC dengan senyawa *Cinchonine* memiliki ikatan yang kuat dan stabil. Hal ini dapat dilihat melalui *binding energy*, *protein-ligand distance*, dan RMSD kompleks tersebut.
- Protein 3UJC yang merupakan protein PfPMT memiliki fungsi yang vital bagi perkembangan parasit *P. falciparum*. Dengan adanya ikatan yang kuat dan stabil terhadap protein tersebut, *Cinchonine* memiliki potensi sebagai senyawa antimalaria yang dapat menghambat fungsi dari protein PfPMT.

5.2 Saran

Penelitian ini menggunakan metode *in silico*, yaitu *molecular docking* dan *molecular dynamics* dalam menentukan ikatan senyawa *A. scholaris* terhadap protein *P. falciparum*. Metode ini tidak dapat menentukan secara akurat sifat *agonis* maupun *antagonis* dari interaksi yang dihasilkan. Oleh karena itu, perlu dilakukan studi lebih lanjut berupa uji *in vitro* maupun *in vivo*. *Molecular dynamics* secara lengkap terhadap seluruh kompleks protein-senyawa juga belum dilaksanakan sehingga perlu dilakukan *molecular dynamics* lebih

lanjut terhadap kompleks protein-senyawa lain untuk menemukan potensi ikatan-ikatan yang kuat dan stabil antara protein *P. falciparum* terhadap senyawa *A. scholaris*.