

BAB V PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Pada penelitian *in-silico* yang dilakukan dengan *molecular docking* dan *molecular dynamics* antara senyawa pada tanaman meniran hijau dan protein pada *P. falciparum* didapatkan sebagai berikut,

1. Dari hasil *molecular docking* didapatkan rata rata ikatan afinitas semua senyawa -7,02 kcal/mol. Ikatan afinitas yang paling kuat (-11,1 kcal/mol) didapat antara senyawa Bergemottin dengan protein Hypoxanthine-guanine-xanthine phosphoribosyltransferase dari *P. falciparum* serta delta afinitas paling positif (kenaikan 3.3 kcal/mol) antara senyawa Bergemottin dengan protein M1 family aminopeptidase.
2. Dari hasil *molecular dynamics* kompleks protein-senyawa yang yang dipilih berdasarkan ikatan afinitas dan delta afinitas tertinggi sebanyak 6 *molecular dynamics* terdiri dari 3 senyawa yang memiliki ikatan tinggi (Bergemottin, β,β -dimethylacrylshikonin, dan Olomoucine), didapat 1 senyawa yang paling stabil (Bergemottin) berdasarkan parameter RMSD , Binding Energy, dan Protein-Ligan Distance. Ikatan paling stabil didapat antara senyawa Bergemottin dengan protein M1 family aminopeptidase.
3. Ikatan Senyawa Bergemottin dengan protein M1 family aminopeptidase dari *P. falciparum* yang berfungsi dalam degradasi hemoglobin untuk menyediakan asam amino yang dibutuhkan parasit dalam sintesis protein dan pertumbuhan terbukti memiliki delta ikatan afinitas yang kuat dengan ikatan paling stabil sehingga berpotensi menjadi target antimalaria dari *phylantus niruri*.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil penelitian, analisis data dan simpulan di atas, maka peneliti mengajukan saran bagi peneliti selanjutnya yang memiliki penelitian serupa untuk melakukan uji *in silico* berupa *molecular docking* dan *molecular dynamics* selain 100 protein yang digunakan dengan senyawa senyawa meniran hijau yang sudah diketahui memiliki sifat antimalaria untuk menemukan lebih banyak potensi target obat antimalaria protein yang lebih baik.