

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil dari penelitian yang telah dilakukan, dapat ditarik kesimpulan sebagai berikut:

1. Dari keseluruhan protein *P. falciparum* pada PDB (n=1.137), terdapat 55 protein yang dipilih sebagai protein target. Interaksi secara komputasi ikatan tafenukuin pada 55 protein *P. falciparum* mengindikasikan potensi tafenukuin sebagai antimalaria falsiparum dibuktikan dengan 23 protein target berikatan lebih kuat dibandingkan dengan ligan awal.
2. Interaksi residu asam amino protein *P. falciparum* dengan tafenukuin dianalisis dengan jumlah ikatan hidrogen yang terbentuk. Asam amino treonin (Thr) merupakan residu yang membentuk ikatan hidrogen paling sering (n = 16/103) dengan tafenukuin pada 11 protein target *P. falciparum*, sedangkan asam amino serin (Ser) menjadi residu dengan kemunculan paling banyak, yaitu pada 14 protein target *P. falciparum* dari 55 protein. Terdapat 13 protein *P. falciparum* dari 55 protein yang tidak membentuk ikatan hidrogen dengan tafenukuin.
3. Hasil analisis *molecular dynamics simulation* antara tafenukuin dengan protein target terpilih (falcipain-2) memiliki nilai RMSD dalam rentang 0.95 – 3.35 Å dengan rata-rata sebesar 2.63 Å lebih rendah dibandingkan dengan RMSD falcipain-2 dengan ligan awal (E64), yaitu 0.99 – 8.07 Å dengan nilai rata-rata 3.7 Å. Senyawa tafenukuin berpotensi sebagai antimalaria dengan inhibisi protein falcipain-2 dibuktikan dengan nilai *binding free energy* (ΔG_{total}) sebesar -15.5 kkal/mol lebih rendah dibandingkan dengan nilai ΔG_{total} ligan awal falcipain-2 (E64), yaitu -8.7 kkal/mol. Dua paramater ini menunjukkan bahwa

afinitas dan stabilitas ikatan antara tafenukuin dengan falcipain-2 lebih baik dibandingkan dengan ligan inhibitor awal yaitu E64.

5.2 **Saran**

Terdapat beberapa saran peneliti untuk penelitian selanjutnya, sebagai berikut:

1. Sejumlah 22 protein *P. falciparum* dengan jenis protease dilakukan yang telah terpilih dilakukan *modelling structure* sehingga dijadikan sebagai protein target dari tafenukuin atau obat antimalaria lain.
2. Penerapan berbagai indikator validasi pada tahap *molecular docking* untuk mempertimbangkan protein yang akan dijadikan reseptor, seperti indikator *Ramachandran score* dan besar resolusi protein.
3. Analisis *molecular dynamics simulation* dengan indikator-indikator lain, seperti RMSF, *Radius of Gyration*, dan SASA dapat dipertimbangkan untuk meningkatkan akurasi dan hasil yang lebih komprehensif.
4. Adanya studi lanjutan berupa studi *in vitro* dan *in vivo* tafenukuin sebagai antimalaria *P. falciparum*.