

BAB V PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Setelah dilakukan penelitian mengenai *molecular docking* dan *molecular dynamics* pada protein *Plasmodium falciparum* dengan ligan tafenokuin, didapatkan hasil yang positif. Hasil dari proses *molecular docking*, didapatkan nilai *binding affinity* dari ikatan protein *Plasmodium falciparum* dengan ligan tafenokuin pada reseptor *Probable M17 family aminopeptidase* yang berjenis hidrolase inhibitor memiliki nilai yang lebih tinggi dengan nilai -7,8 kkal/mol dibandingkan ikatan protein *Plasmodium falciparum* pada reseptor hidrolase inhibitor dengan ligan aslinya dengan nilai -6,6 kkal/mol. Ini menunjukkan kekuatan ikatan yang dimiliki tafenokuin dengan reseptor hidrolase lebih kuat.

Setelah dilakukan proses *molecular docking*, selanjutnya dilakukan *molecular dynamics simulation* dan didapatkan hasil RMSD pada ikatan protein *Plasmodium falciparum* dengan ligan Tafenokuin yang memiliki kestabilan selama proses *molecular dynamics simulation*. Pada nilai *binding free energy* yang dimiliki oleh ikatan protein *Plasmodium falciparum* dengan ligan Tafenokuin juga memiliki nilai yang lebih negatif, menunjukkan kekuatan ikatan yang lebih baik.

5.2 Saran

Peneliti merekomendasikan agar penelitian selanjutnya dapat dilakukan secara *in-vitro* untuk membuktikan hasil penelitian ini. Juga dapat dilakukan pemodelan struktur 3D pada sekuens protein *Plasmodium falciparum* yang belum sempat dilakukan sebelumnya pada penelitian ini