

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian prediksi dan simulasi ikatan antara senyawa obat antimalaria Tafenoquine dengan protein *Plasmodium falciparum* terpilih yaitu Aspartate carbamoyltransferase (dengan ligan yang tertera dalam PDB : EYG/tert-butylN-[5-phenyl-3-(2-phenylethylcarbamoyl)thiophen-2-yl]carbamate) dapat diketahui :

1. *Binding affinity* antara senyawa obat antimalaria Tafenoquine dengan beberapa protein *Plasmodium falciparum* secara *molecular docking*. Dapat dilihat dari hasil penelitian bahwa nilai binding affinity menunjukkan hasil yang beragam pada tiap kompleks ikatan.
2. Stabilitas ikatan secara *molecular dynamics* antara senyawa obat Tafenoquine dengan salah satu protein *Plasmodium falciparum* yang terpilih , yaitu Aspartate carbamoyltransferase. Pada penelitian ini di dapatkan hasil bahwa ikatan protein Aspartate carbamoyltransferase dengan ligan asli yang tertera pada PDB lebih stabil dibandingkan dengan ikatan protein *Plasmodium falciparum* dengan ligan uji Tafenoquine.

5.2 Saran

1. Penelitian ini merupakan penelitian yang berkelanjutan. Dapat melanjutkan pendekatan yang berbeda untuk memperoleh hasil prediksi ikatan interaksi senyawa Tafenoquine dengan protein *Plasmodium falciparum*. Dalam penelitian berikutnya , dapat memenuhi dan melanjutkan dari hal yang belum selesai dilakukan dalam penelitian ini, yaitu melakukan *homology modelling* antara protein protease *Plasmodium falciparum* dengan protein Protease pada SARS-CoV-2.

2. Melakukan penelitian lanjut menggunakan jenis ligan selain ligan inhibitor untuk menilai apakah ada kemungkinan yang sama antara jenis ligan yang satu dengan ligan lain dalam berikatan pada reseptor.