

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Ditemukan total 13 senyawa yang teridentifikasi berdasarkan grafik retention time, dengan senyawa tertinggi pada RT 5.52, yaitu *Rhynchophylline* dengan rumus kimia $C_{22}H_{28}N_2O_4$. Docking *Rhynchophylline* dengan protein *P. falciparum* diperoleh hasil Delta affinity terbesar dengan protein L-Lactate Dehydrogenase (1LDG) yaitu 2.3 Kcal/mol dengan kekuatan binding sebesar -6.7 Kcal/mol. Sedangkan binding terbaik yaitu dengan protein 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose (PfRh5) sebesar -7.1 dengan Delta affinity 1.9.

Dari hasil observasi waktu retensi tersebut, terdapat satu senyawa pada RT 11.07 untuk menjalani docking dengan protein *Plasmodium falciparum*. Senyawa tersebut adalah Cinchonine yang berdasarkan literatur memiliki aktivitas antimalaria (Rawe & McDonnell, 2020; Rosmalena *et al.*, 2018). Hasil docking yang dilakukan menunjukkan bahwa Cinchonine berikatan kuat dengan protein 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose (PfRh5) diperoleh delta affinity 2.1 Kcal/mol dengan binding sebesar -7.3 Kcal/mol. Sedangkan senyawa dengan persentase terbesar yaitu *Rhynchophylline*. Hasil docking *Rhynchophylline* dengan protein *P. falciparum* diperoleh hasil delta affinity terbesar dengan protein L-Lactate Dehydrogenase (1LDG) yaitu 2.3 Kcal/mol dengan kekuatan binding sebesar -6.7 Kcal/mol. Sedangkan binding terbaik yaitu dengan protein 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose (PfRh5) sebesar -7.1 dengan delta affinity 1.9. Hal ini memberikan peluang bahwa kandungan *Rhynchophylline* dan juga kandungan Cinchonine dari ekstrak metanol kulit batang pohon *A. scholaris* berpotensi untuk dikembangkan menjadi obat antimalaria kedepannya.

5.2 Saran

Penelitian ini adalah bertujuan untuk mengetahui senyawa anti malaria dari kulit batang pohon *Alstonia scholaris* khususnya Cinchonine dan *Rhynchophylline*, penelitian *invivo* dan *in silico* ini merupakan tahap awal dalam penemuan obat, untuk itu

sebaiknya dilakukan penelitian lebih lanjut dengan melibatkan serangkaian uji lebih lanjut untuk memastikan efektivitasnya. Lakukan penelitian mendalam terkait mekanisme aksi Cinchonine terhadap protein 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose (PfRh5) dan *Rhynchophylline* terhadap protein L-Lactate Dehydrogenase (LDG) atau dengan protein PfRh5 untuk memahami secara lebih rinci interaksi molekuler yang terjadi atau untuk mengetahui mekanisme aksi. Jika memungkinkan, lakukan uji *in vivo* untuk penelitian klinis lebih lanjut.