

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang dilakukan dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Senyawa-senyawa dari genus *Alphitonia* memiliki potensi aktivitas antibakteri *Mycobacterium tuberculosis* secara *in silico* dengan metode *molecular docking* PLANTs terhadap protein InhA (2X23) karena 14 senyawa potensial memiliki skor *docking* terbaik dibandingkan dengan *native ligand* (TCU) dan juga obat pembanding (isoniazid). Serta terhadap protein RNAP (1YNN) didapatkan 15 senyawa potensial dengan skor *docking* terbaik dibandingkan *native ligand* (RFP) dan juga obat pembanding (rifampicin). Salah satu senyawa potensial tersebut yakni *6'-Heptadecanoyl-3-O-β-D-glucofuranosylsitosterol* yang memiliki skor *docking* terbaik terhadap protein inhA dan RNAP.
2. Interaksi residu asam amino senyawa potensial dari genus *Alphitonia* yakni *6'-Heptadecanoyl-3-O-β-D-glucofuranosylsitosterol* sebagai kandidat terbaik antibakteri *Mycobacterium tuberculosis* terhadap protein inhA (2X23) memiliki 7 kemiripan kedudukan asam amino dari 9 residu asam amino pada *native ligand* (TCU), dibandingkan dengan isoniazid yang hanya memiliki 4 kemiripan residu asam amino. Senyawa potensial yang memiliki lebih banyak kemiripan

residu asam amino dengan *native ligand* pada reseptor RNAP (1YNN) yaitu *Quercetin 3-O- α -L-rhamnopyranosyl (1 \rightarrow 2)- α -L-arabinopyranosyl (1 \rightarrow 2)- α -L-rhamnopyranoside* memiliki 5 kemiripan kedudukan residu asam amino dari 9 residu asam amino *native ligand* (RFP) dibandingkan dengan rifampicin yang hanya 2 kemiripan residu asam amino.

5.2 Saran

1. Besarnya potensi beberapa senyawa pada protein 2X23 dan 1YNN sebagai terapi target antibakteri *Mycobacterium tuberculosis*, maka diharapkan kedepannya dilakukan penelitian terkait modifikasi struktur lebih lanjut pada senyawa potensial.
2. Perlunya juga pengujian secara *in silico* dengan target obat TB yang memiliki mekanisme pengobatan yang berbeda.
3. Perlunya juga pengujian secara *in vitro* untuk senyawa-senyawa dari genus *Alphitonia* yang berpotensi sebagai antibakteri *Mycobacterium tuberculosis*.
4. Perlunya dilakukan praktek *molecular docking* pada mata kuliah kimia medisinal untuk meningkatkan pemahaman mahasiswa dan meningkatkan minat mahasiswa pada penelitian studi *in silico*.