BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian dari studi penambatan molekul senyawa metabolit sekunder herba Putri Malu terhadap penghambatan enzim xantin oksidase dengan kode PDB ID:3NVW menggunakan perangkat lunak AutoDock 4 dapat ditarik kesimpulan sebagai berikut:

1. Terdapat tiga senyawa yang menunjukkan nilai energi ikatan bebas (ΔG) terkecil terhadap enzim XO dibandingkan dengan *native ligand* dan senyawa pembanding Allopurinol yaitu *hernancorizin* sebesar -10,12 kcal/mol, *crocetin* sebesar -8,53 kcal/mol dan *luteolin* sebesar -8,48 kcal/mol. Nilai energi ikatan bebas yang semakin kecil menunjukkan senyawa tersebut berpotensi memiliki aktivitas biologis. Secara keseluruhan semua senyawa terutama tiga senyawa uji terbaik yaitu *hernancorizin*, *crocetin* dan *luteolin* memiliki potensi aktivitas sebagai inhibitor XO.
2. Interaksi residu asam amino pada protein reseptor yang berperan besar dalam terbentuknya ikatan hidrogen paling banyak diperoleh dari residu asam amino yaitu Glu 802 yang memiliki 24 ikatan, kemudian Arg 880, Glu 1261, Thr 1010 memiliki 16 ikatan. Residu asam amino tersebut banyak berkontribusi dalam pembentukan ikatan dan menstabilkan interaksi pengikatan senyawa pada protein XO.

5.2. Saran

Dalam penelitian selanjutnya disarankan untuk melakukan simulasi penambatan molekuler pada protein kristal enzim XO yang berasal dari manusia karena dalam penelitian ini protein kristal yang digunakan berasal dari sapi (*Bos taurus*). Penelitian ini hanya menggunakan 14 senyawa metabolit sekunder dari herba putri malu sehingga diharapkan adanya penelitian lanjutan yang menguji senyawa metabolit sekunder lainnya maupun senyawa golongan flavonoid dari herba putri malu yang berpotensi dalam menghambat aktivitas

enzim XO. Penelitian ini dapat dilanjutkan baik dengan metode komputasi lainnya maupun penelitian eksperimental di laboratorium.