

## BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

### A. Kesimpulan

1. Energi ikatan dari senyawa uji xanthorrhizol, kurkumin,  $\alpha$ -kurkumena,  $\beta$ -kurkumena, dan zingiberene terhadap protein target *CAR* yang dihasilkan rendah yaitu antara -8,0 hingga -9,2 kkal/mol, namun tidak lebih baik dari kontrol positif fenitoin (-10,3 kkal/mol). Energi ikatan terendah yaitu pada senyawa kurkumin sebesar -9,2 kkal/mol.
2. Energi ikatan dari senyawa uji xanthorrhizol, kurkumin,  $\alpha$ -kurkumena,  $\beta$ -kurkumena, dan zingiberene terhadap protein target *PXR* yang dihasilkan rendah yaitu antara -6,8 hingga -8,3 kkal/mol. Kurkumin memiliki nilai energi ikatan yang sama dengan kontrol positif hiperforin yaitu sebesar -8,3 kkal/mol.
3. Senyawa uji membentuk ikatan Van der Waals, Pi-sigma, Alkil, dan Pi-alkil di protein target *CAR* pada asam amino Phe 234 dan Ile 164. Kurkumin membentuk ikatan hidrogen dengan protein target *CAR* pada asam amino Asn165.
4. Senyawa uji membentuk ikatan Van der Waals, Pi-sigma, Pi-Pi stacked, Alkil, dan Pi-alkil di protein target *PXR* pada asam amino Phe 288 dan Trp 299. Kurkumin membentuk ikatan hidrogen dengan protein target *PXR* pada asam amino Ser247.

### B. Saran

Perlu dilakukan penelitian secara *in silico* lebih lanjut untuk mengetahui stabilitas kompleks protein target dengan senyawa uji kurkumin hasil dari *molecular docking* menggunakan simulasi molekular dinamik.