

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

1. Terdapat dua senyawa yang terkandung dalam jahe yang berikatan dengan HRH2 yaitu 2-Acetoxy-1,8-cineole dan 2-(3-Methyl-2-butenyl)-3-methylfuran. Hasil simulasi *docking* menyatakan bahwa senyawa 2-Acetoxy-1,8-cineole merupakan senyawa yang kurang berpotensi berikatan dengan HRH2 karena memiliki *binding affinity* -6,4 kkal/mol, dimana nilai tersebut lebih besar daripada ikatan antara HRH2 dengan *native ligand* famotidine yaitu -6,5 kkal/mol. TYR250 merupakan asam amino berasal dari HRH2 dan membentuk ikatan hidrogen dengan senyawa 2-Acetoxy-1,8-cineole.
2. Hasil simulasi MD menunjukkan bahwa 2-Acetoxy-1,8-cineole memiliki RMSD rata-rata 1,869Å, hal ini menunjukkan bahwa senyawa tersebut tidak berpotensi untuk berikatan dengan HRH2, karena jarak simpangannya yang dekat. Hasil RMSF menunjukkan bahwa asam amino TYR250 memiliki fleksibilitas yang rendah, yaitu 1,156 Å, sehingga dapat berikatan lebih lama dengan senyawa 2-Acetoxy-1,8-cineole.

B. Saran

Disarankan untuk melakukan penelitian *in silico* lebih lanjut terhadap protein-protein target pada toksitas di hepar.