

BAB VII PENUTUP

7.1 Kesimpulan

Simpulan yang dapat diambil dari penelitian ini dirangkum dalam beberapa poin yang tertera di bawah ini, yakni:

1. Hasil uji prediksi QSAR menggunakan PASS Online menunjukkan bahwa terdapat 12 senyawa yang memiliki kemampuan sebagai agen antieczema, terdapat 6 senyawa yang memiliki kemampuan antiinflamasi dan semua senyawa tidak memiliki kemampuan yang baik sebagai histamin inhibitor.
2. Hasil uji ADMET terdapat 15 senyawa mempunyai kemampuan penyerapan yang tinggi dalam gastrointestinal (HIA), ada 11 senyawa yang tidak berpenetrasi ke sawar darah otak, senyawa yang termasuk P-gp substrat terdapat 6 senyawa. Hasil uji Lipinski menunjukkan bahwa terdapat 1 senyawa yang lolos terhadap 3 kriteria Lipinski, 7 senyawa lolos terhadap 4 kriteria dan 11 senyawa lolos terhadap seluruh kriteria lipinski.
3. Ergosterol memiliki nilai afinitas ikatan $-9,71$ kkal/mol, jauh lebih kuat daripada ligan kontrol protein ERK ($-7,88$ kkal/mol) dan ligan pembanding Prednisone ($-8,79$ kkal/mol), dan membentuk delapan interaksi yang sama dengan ligan kontrol pada residu asam amino Ala52, Leu107, Leu156, Cys166, Lys54, Val39 pada ikatan hidrofobik dan Lys114, Glu109 pada ikatan hidrogen. Cholesterol memiliki nilai afinitas ikatan $-11,87$ kkal/mol, jauh lebih kuat daripada ligan kontrol protein p38 ($-8,79$ kkal/mol) dan ligan pembanding prednisone ($-8,91$ kkal/mol), dan membentuk satu interaksi yang sama dengan ligan kontrol pada residu asam amino Lys121 pada ikatan hidrofobik.

7.2 Saran

Penelitian ini menyarankan penelusuran lebih lanjut mengenai potensi senyawa bioaktif ekstrak tinta cumi-cumi sebagai terapi dermatitis atopik pada jalur pathogenesis/patofisiologi lainnya dan ke tahap *molecular dynamics simulations* untuk mengetahui lebih lanjut prediksi aktivitas secara *in silico*. Penelitian ini juga menyarankan dilakukannya penelitian lebih lanjut secara *in vitro* menggunakan sel

primer yang berhubungan dengan dermatitis atopik adan *in vivo* menggunakan hewan ujicoba dengna perlakuan dermatitis atopik untuk melihat efikasi senyawa bioaktif ekstrak tinta cumi-cumi sebagai terapi dermatitis atopik.

