

V. Kesimpulan dan Saran

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian ini dapat disimpulkan:

1. Senyawa kandungan *F. tinctoria* yang menunjukkan hasil yang baik untuk protein 2AZ5 6B8Y, 6Y8M dan 4K7O adalah thalifolin. Hasil dari *docking score* thalifolin konsisten berada di urutan top 10 untuk setiap protein dengan *docking score* masing-masing sebesar -6,419, -5,378, -6,520, dan -5,492 kcal/mol. Thalifolin merupakan kandidat untuk penyembuhan luka dan antioksidan sehingga senyawa ini diambil untuk dioptimasi.
2. Optimasi thalifolin menggunakan metode *pharmacopore based-design* dan *Multi Parameter Optimization*. Optimasi yang dihasilkan untuk tiap protein menghasilkan *docking score* yang menurun. MAR1 untuk protein 2AZ5, MAR2 dan MAR3 untuk protein 6B8Y, dan MAR4 untuk protein 6Y8M dan 4K7O dengan *docking score* masing-masing -6,809, -10,351, -8,580, -6,654, dan -6,470 kcal/mol. *Docking score* sebelumnya hanya menunjukkan skor. -6,419, -5,378, -6,520, dan -5,492 kcal/mol. Berdasarkan *docking score*, dapat disimpulkan senyawa thalifolin berhasil dioptimasi dan dilanjutkan untuk prediksi ADMET.
3. Prediksi ADMET dari hasil optimasi thalifolin menunjukkan penurunan yang signifikan untuk MAR1, MAR3 dan MAR4. Ketiga senyawa ini dapat diambil sebagai kandidat obat penyembuhan luka dan antioksidan dengan uji tambahan seperti *in vitro* dan *in vivo*. Sementara itu, MAR2 yang memiliki struktur mirip dengan MAR3 memiliki hasil prediksi ADMET yang tidak memuaskan. MAR2 perlu dioptimasi lagi dengan tujuan untuk mempertahankan *docking score* yang baik dan juga meningkatkan kemampuan ADME dari senyawa ini.

5.2 Saran

Perlu dilakukan analisis lanjutan dan sintesis untuk senyawa MAR1, MAR 3 dan MAR4 serta uji tambahan seperti *in vivo* dan *in vitro*.