

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

1. Hasil seleksi ADMET menunjukkan 4 senyawa yang menargetkan HRH2 dan memenuhi semua kriteria berupa *Lipinski's rule of five*, TPSA, Gastrointestinal (GI) absorption, ESOL Class, Bioavailability score dan *human hepatotoxicity* yaitu, 5-hydroxyl-ar-turmerone, curzerenone, (4S,5S)-germacrone 4,5-epoxide dan furanodienone.
2. Hasil *molecular docking* dari keempat senyawa uji didapat energi ikatan yaitu 5-hydroxyl-ar-turmerone (-6,7 kkal/mol), curzerenone (-5,7 kkal/mol), (4S,5S)-germacrone4,5-epoxide (-6,1 kkal/mol) dan furanodienone (-5,8 kkal/mol). Hasil tersebut dibandingkan dengan hasil *docking* famotidin sebagai kontrol positif (-6,5 kkal/mol), sehingga 5-hydroxyl-ar-turmerone merupakan senyawa terbaik dari ketiga senyawa lain dan nilai energi ikatannya lebih negatif dari kontrol positif.
3. Hasil *molecular dynamics* menunjukkan nilai rata-rata RMSD dan RMSF dari kompleks protein-5-Hydroxyl-ar-turmerone lebih kecil dibanding kompleks protein-ligan natif. Nilai rata-rata RMSD kompleks protein-ligan natif sebesar 2,8 Å dan nilai rata-rata RMSD kompleks protein-5-Hydroxyl-ar-turmerone sebesar 2,6 Å. Nilai RMSF pada kompleks protein-ligan natif, terdapat dua residu kunci yang nilainya lebih dari 2,5 Å yaitu Asp186 dan Thr190 dan pada kompleks protein-5-Hydroxyl-ar-turmerone, semua residu kunci menunjukkan nilai kurang dari 2,5 Å.

B. Saran

Disarankan untuk dilanjutkan ke uji *in vitro* untuk memvalidasi aktivitas penghambatan reseptor histamin H2 (HRH2) dari senyawa hasil penelitian.