

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, dapat disimpulkan bahwa:

1. Beberapa senyawa turunan flavonoid menunjukkan potensi sebagai kandidat penghambat enzim asetilkolinesterase (AChE) berdasarkan studi *docking* terhadap dua protein target dengan PDB ID: 1EVE dan 4EY7. Di antara senyawa yang diuji, karanjin, luteolin, dan luteolin-7-O-glukosida menunjukkan nilai *binding affinity* yang paling mendekati ligan alami masing-masing protein serta mampu berinteraksi dengan residu-residu aktif penting dalam situs katalitik AChE.
2. Interaksi ketiga senyawa terbaik melibatkan ikatan hidrogen dan ikatan hidrofobik yang kuat, sebagaimana terkonfirmasi melalui visualisasi interaksi molekuler. Selain itu, seluruh senyawa memenuhi kriteria *Lipinski's Rule of Five*, mendukung potensi kelayakan farmakokinetik dan bioavailabilitas oral. Hasil ini menunjukkan bahwa karanjin, luteolin, dan luteolin-7-O-glukosida berpotensi untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai agen terapeutik alternatif dalam penanganan penyakit Alzheimer melalui mekanisme penghambatan AChE.

5.2 Saran

1. Disarankan untuk melakukan uji lanjutan secara *in vitro* dan *in vivo* terhadap senyawa-senyawa yang menunjukkan aktivitas inhibisi tinggi untuk memvalidasi potensi farmakologis dan keamanannya sebagai kandidat obat.
2. Studi lanjutan dengan pendekatan simulasi *Molecular Dynamics* (MD) perlu dilakukan untuk mengevaluasi stabilitas interaksi antara ligan dan reseptor dalam kondisi biologis yang lebih realistis, sehingga memberikan gambaran lebih mendalam mengenai mekanisme kerjanya.