

## **BAB IV**

### **KESIMPULAN DAN SARAN**

#### **A. Kesimpulan**

Berdasarkan hasil penelitian tentang penambatan molekuler, sifat fisikokimia, dan analisis druglikeness, dapat disimpulkan bahwa penambatan molekuler yang dilakukan berhasil mengidentifikasi interaksi penting antara ligan dan target biologis yang relevan. Melalui analisis docking dan evaluasi sifat fisikokimia senyawa yang diteliti, diperoleh informasi yang komprehensif mengenai potensi senyawa tersebut sebagai kandidat obat.

Secara spesifik, analisis sifat fisikokimia menunjukkan bahwa senyawa-senyawa yang diuji memiliki karakteristik yang mendukung kelarutan, stabilitas, dan permeabilitas yang optimal, yang merupakan faktor penting dalam pengembangan obat yang efektif. Beberapa senyawa menunjukkan sifat hidrofobitas yang sesuai untuk penembusan membran sel, sementara lainnya menunjukkan kestabilan termal dan pH yang memadai untuk bertahan dalam kondisi fisiologis.

Selain itu, hasil analisis druglikeness mengindikasikan bahwa beberapa senyawa memenuhi kriteria penting untuk dapat dikembangkan lebih lanjut menjadi obat, dengan mempertimbangkan parameter seperti logP, massa molekul, dan jumlah donor/akseptor ikatan hidrogen. Senyawa-senyawa tersebut menunjukkan profil yang kompatibel dengan prinsip-prinsip obat yang baik, serta potensi untuk menunjukkan aktivitas biologis yang signifikan.

Secara keseluruhan, penelitian ini memberikan wawasan yang berharga mengenai hubungan antara struktur molekuler, sifat fisikokimia, dan potensi farmakologis senyawa, yang dapat mempercepat proses pengembangan obat baru yang lebih efisien dan efektif. Penambatan molekuler yang tepat dan analisis druglikeness yang teliti sangat penting dalam memilih kandidat obat yang memiliki potensi terapeutik terbaik.

#### **B. Saran**

1. Meskipun beberapa senyawa telah menunjukkan hasil yang menjanjikan dalam hal sifat fisikokimia dan profil druglikeness, perlu dilakukan pengujian lebih lanjut dalam uji in vitro dan in vivo untuk memastikan potensi aktivitas biologisnya. Uji-uji ini akan memberikan gambaran lebih jelas mengenai efikasi, toksisitas, dan farmakokinetik senyawa tersebut dalam sistem biologis yang lebih kompleks.

Kedua, penting untuk memperluas analisis sifat fisikokimia dengan mempertimbangkan berbagai parameter lain seperti stabilitas metabolik dan afinitas ikatan pada target biologis yang lebih luas. Hal ini dapat dilakukan melalui teknik seperti pemetaan interaksi molekuler yang lebih mendalam, misalnya dengan menggunakan simulasi dinamik molekuler untuk memprediksi stabilitas dan orientasi senyawa dalam ikatan dengan target.

2. Selanjutnya, dalam hal analisis druglikeness, disarankan untuk mengintegrasikan algoritma prediksi lebih lanjut yang mencakup data lebih besar mengenai senyawa-senyawa yang berhasil diterima oleh sistem biologis. Pendekatan ini akan membantu dalam mengidentifikasi fitur struktural yang lebih spesifik untuk pengembangan obat yang lebih efektif dan aman.
3. Terakhir, sebagai langkah lanjutan, disarankan untuk melakukan sintesis dan optimasi struktur senyawa yang menunjukkan potensi terbaik, serta mengevaluasi variasi strukturnya untuk meningkatkan selektivitas dan potensi terapeutik. Penggunaan teknik seperti desain berbantuan komputer (computational drug design) dan penambatan molekuler berulang dapat mempercepat proses penyaringan dan pemilihan senyawa dengan profil yang lebih baik.
4. Secara keseluruhan, meskipun hasil penelitian menunjukkan potensi yang baik, langkah-langkah lebih lanjut dalam eksperimen laboratorium dan analisis lanjutan diperlukan untuk memvalidasi temuan ini dan mempercepat transisi ke pengembangan obat yang lebih lanjut.

