

## BAB VI

### KESIMPULAN

Analisis LC–HRMS tidak tertarget terhadap ekstrak daun *Bacopa monnieri* menghasilkan 100 fitur metabolit, dengan 64 fitur memperoleh anotasi putatif dan 47 metabolit unik dipertahankan setelah kurasi. Sebanyak 20 metabolit diprioritaskan dan delapan metabolit selanjutnya dievaluasi melalui *molecular docking* terhadap asetilkolinesterase (AChE).

Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa baicalin memperoleh DockTScore paling negatif sebesar  $-10,456$ , sedangkan simulasi dinamika molekuler selama 10 ns menunjukkan bahwa kompleks AChE–kaempferol memiliki RMSD backbone, RMSF, dan Rg yang relatif mendekati kompleks AChE–donepezil. RMSD ligan kaempferol juga lebih rendah dibandingkan donepezil. Meskipun luteolin-7-*O*-glucuronide menunjukkan RMSD backbone dan ligan paling rendah, keunggulan pada satu parameter tidak secara langsung menentukan kandidat utama.

Berdasarkan integrasi hasil *molecular docking*, simulasi dinamika molekuler, evaluasi *drug-likeness*, dan prediksi toksisitas oral akut, kaempferol menunjukkan profil komputasional yang paling seimbang. Kaempferol tidak menunjukkan pelanggaran aturan Lipinski dan diprediksi berada pada kelas toksisitas oral akut V. Oleh karena itu, kaempferol diprioritaskan sebagai kandidat utama untuk validasi eksperimental lebih lanjut. Hasil penelitian ini masih bersifat prediktif dan belum membuktikan aktivitas penghambatan AChE maupun efek nootropik kaempferol secara eksperimental.