

## BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1. Kesimpulan

Dari penelitian yang dilakukan mengenai studi komputasi aktivitas antioksidan dan sitotoksik senyawa turunan antosianin telah dipelajari menggunakan metode DFT/B3LYP/6-31G. Kereaktifan senyawa turunan antosianin dapat diurutkan sebagai berikut: petunidin > delphinidin > sianidin. Berdasarkan parameter kereaktifannya, senyawa petunidin murni lebih baik dibandingkan 3-petunidin glikosida.

Berdasarkan mekanisme reaksi antioksidan, mekanisme pemutusan ikatan OH yang menghasilkan H• dan ArO• lebih cocok dengan mekanisme SPLET karena dihasilkan energi total PA + ETE yang lebih kecil. Analisis pKa senyawa pelargonidin, malvidin, dan peonidin menggunakan *Marvin Sketch 19.25* menunjukkan bahwa pKa senyawa sianidin, delphinidin dan petunidin mendekati pKa darah sehingga dapat dinyatakan larut dalam darah. Penentuan toksisitas senyawa turunan antosianin dengan program OSIRIS menunjukkan bahwa senyawa turunan antosianin memenuhi aturan Lipinsky sebagai kandidat obat, tidak bersifat tumorgenetik, tidak menyebabkan iritasi dan tidak menyebabkan mutasi gen serta memiliki kemiripan skor obat dengan obat yang ada sebesar 0.44. Sesuai dengan persamaan HKSA terpilih didapatkan nilai IC50 teoritik sama dengan eksperimen. Berdasarkan analisis *docking* molekular pada senyawa turunan antosianin secara keseluruhan molekul petunidin dan delphinidin memiliki interaksi yang lebih banyak dengan protein, sehingga lebih potensial sebagai kandidat obat dengan energi *docking* terbesar -5,9044 kkal/mol.

### 5.2. Saran

Penelitian selanjutnya disarankan agar melakukan penelitian dengan senyawa antosianin lainnya agar dapat melihat senyawa antosianin yang paling berpotensi sebagai kandidat obat.