

## BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Dari penelitian yang dilakukan mengenai analisis teoritik aktivitas antioksidan, toksisitas, skor obat dan docking molekuler dari senyawa turunan tiosemikarbazida telah dipelajari dengan menggunakan metode DFT/B3LYP/6-31G. Kereaktifan senyawa turunan tiosemikarbazida diurutkan sebagai berikut : TSC 4 > TSC 2 > TSC 3 > TSC 1. Mekanisme reaksi antioksidan yang cocok untuk pemutusan ikatan NH yang menghasilkan H $\cdot$  dan ArN $\cdot$  adalah mekanisme SET-PT karena menghasilkan energi total IP dan PDE yang lebih kecil. Penentuan toksisitas senyawa turunan tiosemikarbazida dengan perangkat lunak *OSIRIS* menunjukkan senyawa turunan tiosemikarbazida memenuhi aturan Lipinsky sebagai kandidat obat, tidak bersifat mutagenik, tidak berpotensi menyebabkan tumor, dan tidak berpotensi menyebabkan iritasi serta memiliki kemiripan skor obat sebesar 0,353. Berdasarkan persamaan HKSA terpilih yaitu  $y = -470,584 + 0,188 (\text{BDE}) - 0,003 (\text{IP}) - 0,043 (\text{PDE}) - 0,243 (\text{PA})$  diperoleh nilai IC<sub>50</sub> teoritik yang sama dengan eksperimen. Interaksi senyawa turunan tiosemikarbazida lebih spontan dan berinteraksi kimia dengan radikal ROS dibandingkan radikal RNS. Hasil analisis docking menunjukkan bahwa senyawa TSC 4 memiliki interaksi yang lebih kuat dengan protein kanker serviks ditandai dengan energi docking paling negatif dan nilai RMSD yang lebih kecil. Hasil keseluruhan menunjukkan senyawa turunan semikarbazida berpotensi sebagai kandidat obat

### 5.2 Saran

Penelitian selanjutnya disarankan untuk melakukan penelitian dengan menggunakan senyawa sintesis lainnya yang memiliki sifat antioksidan dan toksisitas yang lebih tinggi dan berpotensi sebagai kandidat obat. Peneliti juga menyarankan untuk dilakukan pengujian secara eksperimen terhadap toksisitas senyawa turunan tiosemikarbazida sehingga dapat dibandingkan dengan hasil teoritik dan radikal bebas yang digunakan lebih banyak untuk mengetahui senyawa turunan tiosemikarbazida lebih reaktif terhadap radikal lainnya.