

## BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Berdasarkan penelitian teoritik secara komputasi yang telah dilakukan mengenai aktivitas antioksidan senyawa turunan triazol yang telah dipelajari menggunakan metode DFT/B3LYP/6-31G didapatkan informasi terkait kereaktifan senyawa turunan triazol tersebut berturut – turut, sebagai berikut : Kereaktifan antioksidan Triazol B > Triazol C > Triazol A > Triazol D. Mekanisme pemutusan ikatan ikatan N-H lebih mudah terjadi dengan mekanisme HAT dan pemutusan H radikal lebih mudah oleh Triazol B. Berdasarkan persamaan HKSA yang terpilih yaitu  $Y = 4541,825 + (-2,699) \text{ BDE} + (-0,009) \text{ IP} + (0,082) \text{ ETE}$ , diperoleh nilai  $IC_{50}$  teoritik yang sama dengan eksperimen.

Hasil analisis pKa senyawa turunan triazol menggunakan perangkat lunak *Marvin Sketch 19.25* menunjukkan bahwa senyawa turunan triazol memiliki nilai pKa yang mendekati pKa darah sehingga dapat dinyatakan senyawa turunan triazol dapat larut dengan baik di dalam darah. Penentuan toksisitas senyawa turunan triazol menggunakan perangkat lunak *OSIRIS* menunjukkan bahwa senyawa turunan triazol memenuhi syarat sebagai kandidat obat berdasarkan aturan Lipinski. Senyawa turunan triazol tidak menyebabkan iritasi dan tidak menyebabkan tumor, namun senyawa turunan triazol bersifat mutagenic dan dapat menimbulkan gangguan pada sistem reproduksi.

Hasil interaksi antioksidan dengan radikal menunjukkan semua turunan triazol bereaksi spontan dengan radikal  $\bullet\text{OH}$  dan  $\bullet\text{NO}$  dimana Triazol B bereaksi paling spontan dengan RONS. Hasil analisis docking molekuler menunjukkan Triazol D memiliki skor docking tertinggi sebesar  $-7,468$  kkal/mol untuk protein BRD4 dan  $-7,498$  kkal/mol untuk protein CYP51, namun Triazol B cenderung memiliki nilai RMSD yang lebih kecil (mendekati nol). Hasil keseluruhan menunjukkan bahwa senyawa turunan triazol memiliki aktivitas antioksidan yang baik dengan nilai  $IC_{50}$  pada range  $1,50 - 6,30 \mu\text{g/mL}$  dan berpotensi dijadikan sebagai sebagai obat.

### 5.2 Saran

Penelitian selanjutnya disarankan untuk melakukan penelitian dengan senyawa turunan triazol lainnya dengan aktivitas antioksidan dan toksisitas yang lebih baik. Serta diharapkan pengujian toksisitas senyawa turunan triazol secara eksperimental agar dapat dibandingkan dengan toksisitas secara teoritik.