

BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Penelitian telah dilakukan terhadap studi teoritik aktivitas antioksidan, toksisitas, skor obat, dan docking molekuler senyawa asam klorogenat dan turunannya. Metode yang digunakan adalah DFT/B3LYP/6-31G. Berdasarkan mekanisme reaksi antioksidan, pemutusan ikatan OH yang menghasilkan H• dan ArO• adalah melalui mekanisme HAT karena menghasilkan nilai BDE yang lebih rendah. Hasil analisis parameter reaktivitas global menunjukkan bahwa struktur molekul asam 3-O-kafeoil-1-metil kuinat merupakan senyawa antioksidan terbaik. Urutan reaktivitas yang dianalisis adalah dari senyawa asam klorogenat dan turunannya yang diteliti yaitu asam 3-O-kafeoil-1-metil kuinat > asam 5-O-kafeoil-4-metil kuinat > asam klorogenat > asam 3-O-(3'metil kafeoil) kuinat. Secara teoritik, nilai IC₅₀ dari asam klorogenat dan turunannya menunjukkan hasil yang sesuai dengan hasil eksperimental.

Analisis nilai pKa menggunakan Marvin Sketch 19.25 menunjukkan bahwa senyawa asam klorogenat dan turunannya memiliki kelarutan yang kurang baik dalam darah. Nilai pKa 9,21 yang paling mendekati pH darah, menunjukkan senyawa ini dapat larut sedikit di dalam darah. Senyawa asam klorogenat menunjukkan reaktivitas yang kuat terhadap radikal •OH dan •NO, dengan nilai ΔG negatif yang menandakan reaksi berlangsung spontan. Pengujian toksisitas dengan program OSIRIS menunjukkan bahwa senyawa asam klorogenat dan turunannya memenuhi kriteria aturan Lipinski sebagai kandidat obat, tanpa risiko mutagenik, iritasi, atau gangguan pada sistem reproduksi, dan menunjukkan potensi sebagai obat berdasarkan nilai skor obat yang dimiliki terutama struktur molekul 5-O-kafeoil-4-metil kuinat dengan skor obat tertinggi sebesar 0,725. Analisis docking molekuler menunjukkan bahwa 3-O-kafeoil-1-metil asam kuinat memiliki interaksi terbaik dengan protein 1FC0 dengan RMSD sebesar 1,9677 Å dan energi docking -10,4590 kJ/mol.

5.2 Saran

Studi lebih lanjut disarankan untuk berfokus pada analisis aktivitas antioksidan pada senyawa alternatif, yang menunjukkan sifat dan toksisitas antioksidan yang lebih baik serta potensi sebagai kandidat obat. Selain itu, disarankan untuk meneliti reaksi senyawa antioksidan terhadap radikal ROS/RNS lainnya untuk memperoleh pemahaman lebih lanjut tentang reaktivitas senyawa terhadap radikal bebas.