

## BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian dapat disimpulkan bahwa, berdasarkan mekanisme reaksi antioksidan, mekanisme pemutusan antara ikatan O dan H yang menghasilkan H• dan ArO• lebih cocok dengan mekanisme SET PT karena menghasilkan energi total IP +PDE yang lebih kecil. Senyawa yang memiliki sifat antioksidan paling baik adalah senyawa 1. Analisis sifat toksisitas dan skor obat secara teoritis menunjukkan bahwa senyawa katekin dan senyawa 1, 2, 3, 4, dan 5 tidak toksik. Senyawa katekin dan katekin termodifikasi memiliki nilai skor obat positif (0,453 – 0,871). Katekin memiliki nilai skor obat sebesar 0,871. Senyawa modifikasi yang memiliki nilai skor obat paling tinggi yaitu senyawa 2 dengan nilai skor obat 0,867 mendekati nilai skor obat katekin. Senyawa 1, 2, 3, 4, dan 5 diperkirakan dapat digunakan sebagai antioksidan potensial tanpa efek samping pada sistem biologis. Dari senyawa katekin dan katekin termodifikasi, senyawa yang memiliki interaksi terbaik dengan reseptor kanker serviks dengan kode PDB 5KYK adalah senyawa 1 (3, 5, 7, 4', 5', pentahidroksi 8-nitro flavanol) dengan nilai energi docking -7,7 KJ/mol dan jarak ikatan 2,77 Å. Disusul oleh senyawa 5, senyawa 3, senyawa 4 dan senyawa 2.

### 5.2 Saran

Pada penelitian ini hanya dipelajari sifat antioksidan dari katekin dan katekin termodifikasi secara teoritis dalam fase gas. Penelitian ini disarankan untuk dilanjutkan dalam menentukan sifat antioksidan katekin dan katekin termodifikasi dalam pelarut polar, semipolar dan nonpolar untuk mempelajari pengaruh lingkungan (pelarut) sehingga dapat diketahui fase apa senyawa katekin dan katekin termodifikasi lebih aktif sebagai antioksidan. Melakukn analisis interaksi senyawa direaksikan dengan lebih banyak jenis radikal bebas, agar dapat diketahui senyawa antioksidan reaktif pada radikal bebas apa saja.