

## BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian dapat disimpulkan bahwa analisis sifat antioksidan secara komputasi dalam fase gas menunjukkan senyawa **2** dan **4** memiliki sifat antioksidan paling kuat berdasarkan nilai BDE, SET-PT, ETE dan PA yang kecil dari senyawa scopoletin dan scopoletin termodifikasi lainnya. Senyawa **1, 2, 3, 4, 5** dan **10** diperkirakan memiliki nilai  $IC_{50} < 18,5 \mu M$ , sedangkan senyawa **6, 7, 8** dan **9** memiliki nilai  $IC_{50} > 18,5 \mu M$ . Sifat antioksidan scopoletin dan scopoletin termodifikasi dapat dijelaskan dari mekanisme Transfer Atom Hidrogen (TAH) dengan nilai BDE berkisar antara 69,986 - 90,510 kkal/mol dalam fase gas. Analisis sifat toksisitas dan skor obat secara teoritis menunjukkan bahwa senyawa **1, 2, 3, 4, 5**, dan **10** tidak toksik, scopoletin bersifat resiko menengah terhadap sistem reproduksi, sedangkan senyawa **6, 7, 8**, dan **9** bersifat resiko tinggi (toksik) terhadap sistem reproduksi. Senyawa scopoletin dan scopoletin termodifikasi (**1-10**) memiliki nilai skor obat positif (0,270-0,503) yang menunjukkan bahwa senyawa tersebut memiliki kemiripan obat yang sebanding dengan obat yang ada. Senyawa **1, 2, 3, 4, 5** dan **10** diperkirakan dapat digunakan sebagai antioksidan potensial tanpa efek samping pada sistem biologis.

### 5.2 Saran

Pada penelitian ini hanya dipelajari sifat antioksidan dari scopoletin dan scopoletin termodifikasi secara teoritis dalam fase gas. Penelitian ini disarankan untuk dilanjutkan menentukan sifat antioksidan scopoletin dan scopoletin termodifikasi dalam pelarut polar, semipolar dan nonpolar untuk mempelajari pengaruh lingkungan (pelarut) sehingga dapat diketahui pada fase apa senyawa scopoletin dan scopoletin termodifikasi lebih aktif sebagai antioksidan.