

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Dari penelitian yang dilakukan mengenai studi komputasi aktivitas antioksidan dan sitotoksik senyawa turunan xanton telah dipelajari melalui analisis DFT/B3LYP/6-31G. Kereaktifan senyawa turunan xanton dapat diurutkan sebagai : 3-isomangostin > β -mangostin > gartanin > 8-desoxygartanin = 9-hidroxyalabaxanton = α -mangostin. Berdasarkan parameter kereaktifannya, senyawa 3-isomangostin murni lebih baik dibandingkan 3-isomangostin glikosida.

Berdasarkan mekanisme reaksi antioksidan, mekanisme pemutusan ikatan OH yang menghasilkan H• dan ArO• lebih cocok dengan mekanisme SET-PT karena dihasilkan energi total IP + PDE yang lebih kecil. Penentuan toksisitas senyawa turunan xanton dengan program OSIRIS menunjukkan bahwa senyawa turunan xanton memenuhi aturan Lipinsky sebagai kandidat obat, tidak bersifat tumorgenetik dan tidak menyebabkan iritasi. Penambahan gugus penarik elektron NO₂ baik pada posisi C4 maupun C5 pada senyawa 3-isomangostin dapat meningkatkan nilai IC₅₀. Semakin besar harga IC₅₀ maka senyawa tersebut semakin tidak toksik terhadap sel kanker, semakin kecil nilai IC₅₀ maka semakin besar aktivitas antioksidannya. Maka senyawa 3-isomangostin tanpa dimodifikasi lebih besar aktivitas antioksidannya dibandingkan dengan yang dimodifikasi dengan penambahan gugus penarik elektron NO₂.

Persamaan HKSA terbaik analisis regresi multilinear pada aktivitas antioksidan (log IC₅₀) dengan nilai ETE, PDE, dan IP sebagai variabel bebas adalah sebagai berikut :

$$Y = -29,603 + (-6,832) (IP) + (-3,447) (PDE) + 3,237 (ETE)$$

Analisis regresi multilinear pada aktivitas sitotoksik (log IC₅₀) dengan qC₁, qO, polarizability (Pol), log P, momen dipol, E_{HOMO}, dan E_{LUMO} sebagai variabel bebas, maka diperoleh persamaan terpilih HKSA adalah sebagai berikut :

$$Y = 30,240 + 7,303 (qC_1) + 35,604 (qO) + (-0,026) (Pol) + (-0,285) (\text{momen dipol}) + (-0,567) (E_{LUMO})$$

Berdasarkan studi *docking* molekular pada senyawa turunan xanton secara keseluruhan molekul 3-isomangostin dan gartanin memiliki interaksi yang lebih banyak dengan protein, sehingga lebih potensial sebagai kandidat obat

5.2 Saran

Penelitian selanjutnya disarankan untuk melakukan penelitian dengan senyawa lain yang memiliki sifat antioksidan dan toksisitas yang tinggi dan berpotensi sebagai kandidat obat.

