

## BAB V

### PENUTUP

#### A. Simpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka dapat diperoleh kesimpulan bahwa:

1. Persamaan HKSA yang dihasilkan untuk memprediksi model senyawa baru turunan TAM adalah  $\text{Log IC}_{50} = 6,564 - (0,000004952 * \text{AM1\_Eele}) - (0,322 * \text{logS}) - (0,061 * \text{vol}) + (0,023 * \text{VSA})$ . Persamaan ini terdiri dari empat deskriptor yang mewakili parameter hidrofobik ( $\pi$ ), elektronik ( $\sigma$ ), dan sterik ( $E_s$ ). Hasil yang diperoleh sesuai dengan kriteria validasi, dengan nilai  $q^2$  sebesar 0,711455,  $F_{\text{hitung}}/F_{\text{tabel}}$  3,633089, PRESS 0,427897,  $r$  sebesar 0,967, dan  $r^2$  sebesar 0,935.
2. Dari 9 senyawa baru yang dihasilkan, 4 senyawa (R16c, R16d, R16e, dan R16h) memiliki aktivitas anti-tuberkulosis yang lebih baik. Namun, 5 senyawa lainnya (R16a, R16b, R16f, R16g, dan R16i) menunjukkan aktivitas yang lebih buruk.
3. Sebanyak 9 senyawa baru menunjukkan prediksi yang lebih baik pada beberapa parameter, seperti absorpsi, distribusi, dan metabolisme. Untuk parameter ekskresi, hanya senyawa R16b, R16c, R16d, R16f, dan R16h yang menunjukkan aktivitas lebih baik. Pada parameter toksisitas, 9 senyawa baru ini memiliki hasil lebih baik pada indikator Tikus LD50, *T. pyriformis toxicity*, dan sebagian pada indikator Maksimal Dosis yang Dapat

Ditoleransi (Manusia). Namun, pada indikator *Oral Rat Chronic Toxicity* dan *Minnow toxicity*, semua senyawa baru menunjukkan aktivitas yang lebih rendah.

## **B. Saran**

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, peneliti memberikan saran sebagai berikut:

1. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut ketahap *molecular docking* untuk melihat lebih jelas interaksi yang terjadi antara ligan uji (senyawa baru turunan TAM) dan sisi aktif reseptor (*pks13*) didalam tubuh.
2. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut setelah *molecular dynamic*, yaitu ketahap *in vitro* dalam pengujian skala laboratorium untuk memastikan potensinya sebagai obat anti-tuberkulosis baru.