

BAB V

PENUTUP

A. Simpulan

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

1. Persamaan HKSA yang didapatkan untuk memprediksi model senyawa baru turunan triazole pyranopyrimidine, yaitu $\text{LogIC}_{50} = 17,275 + (0,006 * \text{AM1_HF}) - (0,005 * \text{ASA_P}) - (2,072 * \text{MR}) + (0,040 * \text{Vol})$. Persamaan ini terdiri dari empat deskriptor yang mewakili parameter hidrofobik (π), elektronik (σ), dan sterik (E_s). Hasil yang diperoleh sesuai dengan kriteria validasi, dengan nilai q^2 sebesar 0,74827; PRESS 0,0041; $f_{\text{hitung}}/f_{\text{tabel}}$ 18,1801; R sebesar 0,992; dan r^2 sebesar 0,985.
2. Melalui permodelan, dihasilkan 11 senyawa baru yang memiliki aktivitas antituberkulosis. Berdasarkan pengamatan, terdapat 4 senyawa yaitu S24C, S24D, S24G, dan S24H, memiliki aktivitas yang lebih baik dibandingkan dengan senyawa penuntun.
3. Berdasarkan hasil prediksi ADMET, senyawa S24C menunjukkan profil farmakokinetik dan toksisitas terbaik. Senyawa ini memiliki absorpsi usus (*Intestinal absorption*) yang tinggi yaitu sebesar 75,07% yang menunjukkan kemampuan serapan oral yang sangat baik, serta kelarutan cukup memadai. Pada aspek distribusi, senyawa S24C memiliki nilai VD_{ss}

sebesar 0,068 L/kg, nilai fraksi bebas moderat sebesar 0,09, artinya sekitar 9% senyawa berada dalam bentuk bebas yang aktif secara farmakologis, sementara sisanya terikat protein plasma, sehingga senyawa tetap efektif di plasma dan aman digunakan. Pada aspek Metabolisme, prediksi menunjukkan tidak menghambat enzim CYP450 utama sehingga potensi interaksi obat akibat metabolisme rendah. Sementara pada aspek ekskresi, nilai clearance tergolong sedang dan bukan substrat renal OCT2, menandakan eliminasi yang baik. Dari sisi toksisitas, S24C bersifat non-mutagenik, tidak hepatotoksik, non-karsinogenik, dan tidak memicu kardiotoxik, sehingga relatif aman digunakan. Dengan demikian, S24C dapat disimpulkan sebagai kandidat paling potensial untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai obat baru anti-tuberkulosis.

B. Saran

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, peneliti memberikan beberapa saran yang diharapkan dapat menjadi pertimbangan dalam penelitian selanjutnya, diantaranya sebagai berikut:

1. Diperlukan penelitian lanjutan untuk memperkuat hasil yang diperoleh melalui uji secara *in silico* (*molecular docking*) yang dapat menunjukkan interaksi spesifik antara senyawa baru turunan triazole dengan reseptor mPtpB secara lebih komprehensif.

2. Sebagai tahapan berikutnya setelah analisis *molecular docking*, disarankan dilakukan uji *in vitro* untuk memastikan aktivitas senyawa tersebut sebagai kandidat obat antituberkulosis.