

Bab VII Penutup

VII.1 Kesimpulan

- 1) Model persamaan hubungan kuantitatif struktur aktivitas (HKSA) didapat dengan menggunakan deskriptor paling berpengaruh yaitu LogP, EGibbs, Balaban Index, *Connolly accesible Area* (CAA) dan *Conolly Surface Excluded Volume* (CSEV).
- 2) Diperoleh 10 kandidat senyawa baru turunan benzimidazol yang diprediksi mempunyai aktivitas lebih baik yaitu senyawa B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, dan B10
- 3) Senyawa yang mempunyai ΔG dan K_i yang lebih baik adalah B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, dan B9 dengan nilai berturut-turut ΔG (kkal/mol) adalah -9,95; -9,48; -9,45; -9,59; -10,68; -10,59; -9,42; -9,61; dan -11,14 sedangkan K_i (nM) adalah 50,87; 112,92; 117,35; 93,85; 14,88; 17,19; 124,82; 89,65; dan 6,87.

VII.2 Saran

Dibutuhkan penelitian lebih lanjut berupa pengujian secara *in vitro* terhadap senyawa turunan benzimidazol yang memiliki prediksi aktivitas biologi yang lebih baik.