

BAB V

KESIMPULAN

5. 1 Kesimpulan

1. Persamaan HKSA dari turunan skopoletin yang valid adalah:

$$\text{LogIC50} = (-0,10956 * \text{LogP}) + (105,46693 * \text{LUMO}) - (18,97488 * \text{HOMO}) \\ (0,05114 * \text{RMS}) + 0,59254$$

2. Dari 20 senyawa turunan baru yang diprediksi secara HKSA, 13 diantaranya menunjukkan potensi aktivitas yang lebih tinggi dari senyawa acuan. Namun, berdasarkan hasil penambatan molekul senyawa *3-((5-(kumarin-7-iloksi)pentil)oksi)-4-(fenilsulfonil)isoksazol-5-karboksilat* (S3) dan *3-((7-(kumarin-7-iloksi)heptiloksi)-4-(fenilsulfonil)isoksazol-5-karboksilat* (S4) memiliki afinitas pengikatan yang lebih baik terhadap reseptor target, dengan interaksi hidrogen dan hidrofobik yang signifikan.