

## BAB V

### SIMPULAN, IMPLIKASI DAN REKOMENDASI

#### 5.1 Simpulan

Berdasarkan hasil penelitian didapatkan simpulan sebagai berikut:

1. model persamaan QSAR untuk prediksi aktivitas senyawa turunan fenilpirimidin dengan deskriptor graf, yaitu:

$$EC_{50} = + 1,6629 (\pm 0,5163) [EVe1] + 0,0001 (\pm 0,0001) [EVm2] - 8,4535 (\pm 3,2011) [EVz0] + 6371,0574 (\pm 4358,8525) [EVr-3] + 43,8272 (\pm 49,2207)$$

$$R = 0,907; R_{tr}^2 = 0,823; Q^2 = 0,714; F = 18,616; r_m^2 = 0,695; R_{val}^2 = 0,7909.$$

2. Model persamaan QSAR yang diperoleh dapat digunakan untuk mendesain struktur turunan fenilpirimidin baru. Senyawa desain terbaik yaitu 7\_1, 8\_3 dan 10\_3 dengan nilai  $EC_{50}$  berturut-turut -5,9 mg/L, -7,3 mg/L, dan -8,2 mg/L.
3. Berdasarkan hasil studi molecular docking senyawa yang paling berpotensi sebagai antijamur *S. sclerotiorum* adalah senyawa 7\_1 dan 8\_3 dengan hasil docking score -4,2 kkal/mol dan -4,3 kkal/mol. Kedua senyawa tersebut memiliki hasil docking score lebih baik dari senyawa komersial.

#### 5.2 Implikasi dan Rekomendasi

Berikut beberapa implikasi dan rekomendasi yang dapat dilakukan untuk mengembangkan penelitian ini:

1. Pemodelan QSAR dengan metode lain sebagai pembanding dari pemodelan berbasis graf pada penelitian ini.
2. Penggunaan nilai log aktivitas pada pencarian model persamaan QSAR.