

## BAB V

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### 5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian, didapatkan simpulan sebagai berikut:

1. Model persamaan QSAR untuk memprediksi aktivitas biologis senyawa turunan pirazol karboksamida sebagai inhibitor suksinat dehidrogenase dengan deskriptor elektronik, yaitu:

$$\begin{aligned} \log EC_{50} = & 2,3936 (\pm 0,9447) [C13] + 9,1367 (\pm 3,0682) [C10] \\ & + 2,2473 (\pm 0,6055) [HOMO] - 48,1289 (\pm 14,1289) [C4] \\ & + 1,3937 (\pm 0,9465) [C14] + 28,3750 (\pm 6,6731) \end{aligned}$$

$$R_{tr}^2 = 0,8911; Q^2 = 0,793; F = 28,079; R_{val}^2 = 0,9908; RMSE = 0,3450$$

2. Hasil analisis uji statistika MLR dan PCA menunjukkan bahwa model persamaan QSAR yang diperoleh telah valid dalam memprediksi aktivitas
3. Model persamaan QSAR yang diperoleh dapat digunakan untuk mendesain struktur turunan pirazol karboksamida baru. Senyawa desain terbaik yaitu senyawa A1, A5, dan A7 dengan nilai log EC<sub>50</sub> berturut-turut sebesar -1,8524 mg/L, -1,9593 mg/L, -2,4079 mg/L.
4. Berdasarkan hasil studi *molecular docking* dapat diketahui bahwa senyawa desain turunan pirazol karboksamida baru yang paling berpotensi sebagai inhibitor suksinat dehidrogenase yaitu senyawa A1, A5, dan A7 dengan hasil *docking score* masing-masing sebesar -4,9 kkal/mol, -5,1 kkal/mol, dan -5,3 kkal/mol. Ketiga senyawa tersebut memiliki hasil *docking score* lebih baik dibandingkan senyawa komersial.

#### 5.2 Saran

Berikut ini beberapa saran yang diperlukan untuk dapat mengembangkan penelitian ini, antara lain:

1. Perlu dilakukan pemodelan QSAR dengan menggunakan metode lain sebagai pembanding dengan hasil yang telah diperoleh pada penelitian ini.
2. Perlu dilakukan verifikasi hasil lebih lanjut dengan metode lain, terutama menggunakan studi *in vitro* atau studi *in vivo*.