

## BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan, maka didapatkan kesimpulan sebagai berikut:

1. Aktivitas biologis berupa reaktivasi enzim asetilkolinesterase yang terinhibisi organofosfat dalam bentuk  $\log IC_{50}$  dapat diprediksi dengan metode 3D-QSAR. Model persamaan 3D-QSAR dengan metode MLR yang didapatkan adalah:
  - a. Persamaan model 1
$$\log IC_{50} = 0.1943 (\pm 0.0475) [RDF115u] - 0.0910 (\pm 0.0668) [RDF155e] - 0.1115 (\pm 0.0142) [RDF25i] - 17.7959 (\pm 4.8605) [E1e] + 16.0383 (\pm 2.6845)$$
$$R_{tr}^2 = 0,958; Q^2 = 0,932; F = 81,190; R_{val}^2 = 0.7902; RMSE = 0,564$$
  - b. Persamaan model 2
$$\log IC_{50} = 0.1992 (\pm 0.0464) [RDF115u] - 0.2658 (\pm 0.1751) [RDF155p] - 0.1126 (\pm 0.0136) [RDF25i] - 18.1643 (\pm 4.7041) [E1e] + 16.2485 (\pm 2.5996)$$
$$R_{tr}^2 = 0,962; Q^2 = 0,938; F = 88,948; R_{val}^2 = 0.7689; RMSE = 0,5686$$
2. Desain struktur senyawa dibuat sebanyak 9 buah dan didapatkan senyawa yang memiliki prediksi aktivitas paling baik dengan nilai prediksi  $\log IC_{50}$  dari senyawa non-oksim U6 sebesar 0,103 (model 1) atau 0,20 (model 2); U7 sebesar 0,142 (model 1) atau 0,179 (model 2); dan dari senyawa oksim non-kuarternier U5 sebesar 1,19 (model 1) atau 1,33 (model 2).
3. Reaktivator oksim non-kuarternier dan non-oksim hasil desain memiliki interaksi molekuler dengan enzim asetilkolinesterase yang terinhibisi organofosfat dengan *docking score* pada reaktivator U5 sebesar -9,5 kkal/mol; U7 sebesar -9,1 kkal/mol; dan nilai terbesar pada U6 dengan *docking score* sebesar -9,7 kkal/mol. Dari nilai tersebut dapat disimpulkan bahwa senyawa U6 memiliki afinitas yang paling tinggi dari ketiga reaktivator, menjadikannya reaktivator yang paling potensial.

## 5.2 Saran

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

1. Perlu dilakukan analisis pemodelan 3D-QSAR menggunakan metode lain sehingga dapat dibandingkan dengan hasil yang telah diperoleh pada penelitian ini.
2. Senyawa reaktivator hasil desain dengan prediksi 3D-QSAR dan studi *molecular docking* terbaik direkomendasikan untuk disintesis dan diuji aktivitasnya secara eksperimen.
3. Perlu dilakukan analisis lebih lanjut menggunakan *Molecular Dynamics* untuk melihat interaksi lebih detail antara senyawa desain dengan reseptor.