

BAB VI

SIMPULAN DAN SARAN

6.1 Simpulan

Skринing virtual 80 senyawa Flavonoid dilakukan meliputi *skринing* berdasarkan prediksi aktivitas antivirus dihasilkan 71 senyawa yang menunjukkan aktivitas antivirus, 26 senyawa diantaranya memiliki probabilitas yang rendah dan terdapat lima senyawa yang memiliki probabilitas yang tinggi yaitu *Rhoifolin*, *Isoquercetin*, *Rutin*, *Epigallocatechin* dan *Naringin*. Pada prediksi *druglikeness* dihasilkan 64 senyawa Flavonoid memenuhi aturan *lipinski's rule of five*. Pada prediksi farmakoninetika dihasilkan 15 senyawa Flavonoid yang diprediksi memiliki absorpsi dan distribusi yang baik. Pada prediksi toksisitas dihasilkan lima senyawa yang diprediksi memiliki resiko pemaparan yang rendah dan karsinogenik *genotoxic*, lima senyawa diprediksi karsinogenik *non-genotoxic* serta 13 senyawa diprediksi memiliki sifat mutagen. Sedangkan pada simulasi *molecular docking* menggunakan reseptor ID PDB 5RL4, 5R77 dan 7BUY dengan menghasilkan nilai ΔG saat *redocking* yaitu -8,47 kkal/mol, -6,91 kkal/mol dan -6,49 kkal/mol. Simulasi *molecular docking* pada ketiga reseptor tersebut dihasilkan dua senyawa yang memiliki nilai paling rendah yaitu senyawa *Naringin* dan *Rutin*. Nilai ΔG yang dihasilkan dari *redocking* Ketika penambatan dengan ID PDB 5RL4 senyawa *Naringin* dan *Rutin* menghasilkan nilai ΔG -10,13 kkal/mol dan -9,57 kkal/mol. Pada penambatan dengan

ID PDB 5R7Y menghasilkan -9,84 kkal/mol dan -8,85 kkal/mol. Sedangkan pada penambatan dengan ID PDB 7BUY menghasilkan -9,69 kkal/mol dan -8,97 kkal/mol. Kedua senyawa tersebut menjadi kandidat anti-SARS-CoV-2 yang paling berpotensi karena memiliki nilai afinitas lebih rendah dari *native* ligan.

6.2 Saran

Perlu dilakukan penelitian selanjutnya untuk pengujian *in silico* yang lain yaitu *molecular dynamic* untuk melihat kestabilan antara ligan dan reseptor, sehingga kedua senyawa tersebut memiliki hasil yang lebih baik dalam kondisi yang dibuat semirip mungkin dengan fisiologis tubuh manusia. Selain itu, lakukan sintesis senyawa *Naringin* dan *Rutin* semirip mungkin dalam pembuatan obat anti-SARS-CoV-2 sebagai inhibitor *main*