

BAB V

SIMPULAN, IMPLIKASI DAN REKOMENDASI

5.1 Simpulan

Berdasarkan dari hasil temuan pada penelitian ini, maka didapat simpulan sebagai berikut.

1. Hasil prediksi dari aktivitas biologis yang dimiliki oleh senyawa pada ikan sidat terkait imunitas yaitu antivirus (Influenza), antivirus (Non-Influenza), Immunomodulator, Immuno
2. Hasil prediksi dari senyawa yang digunakan sebagai ligan pada penelitian ini memenuhi aturan Lipinski's Rule of Five.
3. Hasil dari penambatan pada reseptor M^{pro} dan RBD SARS-CoV-2 berhasil tertambat oleh Chenodeoxycholic acid 3-sulfate, Androstanolone, 4,4-dimethyl-5alpha-cholesta-8,14,24-trien-3beta-ol, 1beta-Hydroxycholic acid, dan Androst-4-en-3-one. Senyawa-senyawa tersebut memiliki hasil ikatan yang lebih kuat diantara senyawa yang lainnya.
4. Berdasarkan peran dari setiap struktur genom SARS-COV-2 yang memiliki peran dalam patogenesis dapat memberikan gambaran terkait mekanisme kerja SARS-CoV-2 yang dapat terlibat dalam terapi COVID-19.

5.2 Implikasi

Hasil dari penambatan molekul beberapa senyawa dari sampel daging ikan sidat diprediksi dapat menjadi senyawa antiviral potensial terhadap reseptor virus Sars-CoV-2. Hal ini didukung oleh prediksi aktivitas biologis seperti antiinflamasi, dan antioksidan dengan nilai probabilitas yang tinggi, selain itu senyawa-senyawa yang ditambatkan pada penelitian ini memenuhi kriteria Lipinski sebagai senyawa obat. Diharapkan penelitian ini dapat meningkatkan pemanfaatan ataupun konsumsi dari ikan sidat di Indonesia.

5.3 Rekomendasi

Meskipun hasil dari metode secara *in silico* penambatan molekuler pada senyawa dari sampel ikan sidat menunjukkan adanya prediksi senyawa potensial terhadap penghambatan virus Sars-CoV-2. Pengujian penambatan pada penelitian ini masih terbatas pada reseptor *wild-type* dengan tidak adanya mutasi pada virus,

penambatan molekuler pada reseptor dengan adanya perubahan struktur sekuens pada reseptor dapat dilakukan untuk mengevaluasi konsistensi kemampuan dari senyawa uji sebagai inhibitor pada Sars-CoV-2. Selain itu metode penambatan ini hanya mampu memprediksi interaksi antara ligan dan protein target pada simulasi *grid* yang telah ditentukan, oleh karena itu diperlukan validasi lebih lanjut yaitu dengan dinamika molekuler. Metode ini dapat menjelaskan prediksi interaksi ligan dan protein target dalam kondisi lebih kompleks dan waktu yang dapat diketahui. Setelah pengujian tahap secara *in silico*, maka pengujian skala laboratorium senyawa dengan hasil terbaik dapat divalidasi dengan uji *in vitro* maupun *in vivo*.