

BAB 5. PENUTUP

5.1 KESIMPULAN

Berdasarkan energi pengikatan, paxlovid merupakan kandidat anti SARS-CoV-2 terbaik karena merupakan ligand control yang digunakan sebagai obat COVID-19 di Indonesia saat ini. Dari sepuluh ligand uji, *oleanolic acid* merupakan hasil yang terbaik dilihat dari energi pengikatannya serta stabilitas strukturalnya (RMSD, RMSF, dan Rg), *oleanolic acid* menunjukkan potensi besar sebagai kandidat desain obat baru, terutama dari sisi stabilitas kompleks. Namun, untuk memastikan efektivitasnya, ΔG total harus ditingkatkan agar mendekati atau bahkan melebihi paxlovid. Sehingga, dengan kombinasi stabilitas dan afinitas yang tinggi, *oleanolic acid* bisa menjadi kandidat anti SARS-CoV-2 yang sangat menjanjikan.

5.2 SARAN

Disarankan untuk memodifikasi struktur kimia *oleanolic acid* untuk meningkatkan ΔG total, serta evaluasi profil ADMET untuk membandingkan dengan paxlovid. Adapun modifikasi struktur yang dapat dilakukan adalah dengan menambahkan gugus polar untuk meningkatkan interaksi ikatan hydrogen. Dapat juga dilakukan dengan menggabungkan *oleanolic acid* dengan ligand yang sudah diketahui memiliki afinitas yang tinggi, dalam hal ini yaitu paxlovid. Sehingga menghasilkan senyawa hibrid dengan afinitas yang lebih tinggi dan stabilitas structural yang baik.