

POTENSI SENYAWA ANTIVIRUS PADA GLETANG (*Tridax procumbens* Linn.) DALAM MENGHAMBAT RESEPTOR 3CLpro VIRUS SARS-COV-2 SECARA IN-SILICO

YUNA ISLAMIATI

1177020087

ABSTRAK

Virus SARS-CoV-2 menyebabkan penyakit tingkat pandemi sejak akhir tahun 2019. Transmisi virus berlangsung secara cepat melalui droplet yang menginfeksi inangnya pada saluran pernapasan. Perbanyakannya melalui proses translasi genom +ssRNA yang selanjutnya terjadi proses replikasi untuk membentuk bagian tubuh virus yang baru dan dirangkai menjadi virion yang siap menginfeksi. Selama proses replikasi, genom virus hasil translasi berupa polyprotein akan dipotong menjadi komponen yang lebih kecil oleh protease, salah satunya adalah 3CLpro. Keberadaan reseptor 3CLpro digunakan dalam pengembangan obat melalui proses penambatan molekuler secara *in-silico* untuk dapat meminimalisir kegagalan sebelum dilakukan pengujian skala laboratorium. Senyawa yang digunakan dalam menghambat reseptor 3CLpro berasal dari tanaman gletang (*Tridax procumbens* Linn.) yang mudah dijumpai dan memiliki kemampuan sebagai antivirus. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui nilai energi pengikatan dan interaksi antara senyawa dan reseptor serta mengetahui pengaruhnya sebagai komponen obat. Penelitian dilakukan secara *in-silico* melalui proses penambatan molekuler pada reseptor 3CLpro virus SARS-CoV-2 oleh senyawa antivirus pada tanaman gletang (*Tridax procumbens* Linn.), diantaranya adalah senyawa myricetin, quercetin, betulinic acid, kaempferol dan lignan. Hasil penelitian menunjukkan nilai energi pengikatan senyawa myricetin sebesar -7.1 kcal/mol, quercetin sebesar -6.8 kcal/mol, betulinic acid sebesar -6.6 kcal/mol, kaempferol sebesar -6.4 kcal/mol dan lignan sebesar -5.9 kcal/mol adapun interaksi senyawa berupa ikatan hidrogen, elektrostatik, hidrofobik dan van der Waals. Jika dibandingkan senyawa baicalein sebagai kontrol positif dengan nilai energi pengikatan sebesar -6.7 kcal/mol dan interaksinya dengan reseptor 3CLpro, bahwa senyawa myricetin lebih baik dan memiliki kemampuan sebagai komponen obat sehingga berpotensi dalam menghambat reseptor 3CLpro.

Kata kunci : antivirus, gletang, *in-silico*, reseptor 3CLpro, SARS-CoV-2