

**POTENSI SENYAWA SESKUITERPENOID *Saussurea costus* (Falc.) Lipsch  
DALAM MENGHAMBAT RESEPTOR SPIKE PROTEIN SEBAGAI ANTIVIRUS  
SARS-COV-2 SECARA *IN SILICO***

Milda Kurnia Agung

1177020048

**ABSTRAK**

*Corona virus disease* atau Covid-19 merupakan penyakit zoonosis yang berkembang menjadi pandemik disebabkan oleh virus SARS-Cov-2. Saat ini vaksin sudah mulai diaplikasikan pada manusia sehingga dapat mencegah terinfeksi virus ini, namun untuk mengatasi orang yang telah terinfeksi antivirus perlu dikembangkan. *Saussurea costus* (Falc.) Lipsch mengandung senyawa seskuiiterpenoid yang memiliki aktivitas antivirus. Penelitian ini dilakukan secara *in silico* dengan metode penambatan molekuler untuk memprediksi jenis senyawa seskuiiterpenoid yang memiliki potensi antivirus terhadap protein *spike*. Senyawa Seskuiiterpenoid yang digunakan terdiri dari Dehidrocostonus lactone, 7 $\alpha$ -Hydroxydehydrocostus lactone, Gallicadiol, Magnolialide, Saussureamine A, Picriside B, Germecrene Acid, dan Sulfocostunolide A. Penelitian ini dilakukan dengan teknik *in silico*. Database PDB dan Pubchem digunakan untuk memperoleh ligan dan reseptor dan software Pyrx, Biovia Discovery Studio 2020, CASTp server, Senjeeveni, pkCSM, dan protox-II digunakan untuk menambatkan molekul dan uji sifat fisikokimia serta uji sifat farmakokinetik senyawa. Analisis penelitian ini berdasarkan sifat farmakokinetik, nilai *binding Affinity*, nilai RMSD serta interaksi yang terjadi antara ligan dan reseptor. Hasil penelitian ini didapatkan dehidrocostonus merupakan senyawa yang memiliki sifat farmakokinetik lebih baik dibandingkan senyawa lainnya, perbandingan nilai *binding affinity* dari delapan senyawa uji yaitu -6.3 kkal/mol untuk senyawa Magnolialide, -5.9 kkal/mol untuk Sulfocostunolide A dan Picriside B, -6.0 kkal/mol untuk senyawa Gallicadiol, -5.6 kkal/mol untuk senyawa 7 $\alpha$ -Hydroxydehydrocostus lactone dan Saussureamine A, 5.3 kkal/mol untuk senyawa Dehidrocostonus lacton dan -5.3 kkal/mol untuk senyawa Germecrene Acid. Berdasarkan perbandingan nilai energi ikatan tersebut diketahui bahwa senyawa Magnolialide memiliki nilai yang lebih rendah dan memiliki interaksi yang stabil dibandingkan senyawa lainnya sehingga memiliki kemampuan terbaik untuk menghambat penempelan S-RBD dengan ACE2 dan berpotensi sebagai antivirus SARS-CoV-2.

**Kata Kunci:** Antivirus, *In-silico*, Spike Sars-Cov-2, *Saussurea costus* (Falc.) Lipsch, Seskuiiterpenoid.