

**POTENSI KAYU PUTIH (*Melaleuca leucadendra*) SEBAGAI ANTIVIRUS
SARS-COV-2 MELALUI PENDEKATAN SCREENING
PHARMACOPHORE**

Ghea Gema Adzani

1187020022

ABSTRAK

COVID-19 ini merupakan virus yang muncul pada akhir 2019 dan menghebohkan dunia. Virus ini pertama kali terdapat di kota Wuhan China. Virus ini menyebabkan penyakit seperti gangguan pernafasan, demam, bahkan hingga kematian. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi tanaman kayu putih (*Melaleuca leucadendra* L.) sebagai antivirus COVID-19 melalui deskriptif eksploratif menggunakan *screening pharmacophore* dengan menggunakan *database* dari web Pubchem dan Pharmchem. *Database* yang digunakan ialah berupa senyawa uji yang diambil dari Pubchem, juga *active set* dan *decoy set* yang diambil dari Pharmchem. Penelitian ini menggunakan *software* LigandScout yang hasilnya menunjukkan *pharmacophore fit score* yang menentukan senyawa tersebut dapat dijadikan sebagai kandidat obat atau tidak serta pemodelan dari farmakofornya. Hasil dari pemodelan tersebut digunakan untuk *screening dataset* untuk mengetahui pemodelannya sudah baik atau tidak. Berdasarkan hasil, *pharmacophore fit score* yang paling tinggi ialah senyawa Alpha-Terpineol, yaitu 49,19%. Namun meskipun nilai tertinggi, senyawa Alpha-Terpineol tidak memiliki potensi sebagai kandidat obat COVID-19, karena nilai yang baik untuk dijadikan kandidat obat ialah pada rentang $\geq 70\%$. Hasil dari pemodelan ini dikatakan tidak, dikarenakan ketidakmampuan dalam menskrining senyawa aktif yang lebih banyak dibandingkan dengan yang tidak aktif. Dari 1240 senyawa, 1200 merupakan *decoy set* dan 40 merupakan *active set*, pemodelan ini menghasilkan *hits* hanya sebanyak 20 dan semua berstatus atau berasal dari *decoy*.

Kata Kunci: Kayu Putih, *Melaleuca leucadendra*, SARS-CoV-2, Farmakofor