

ABSTRAK

Acong Jaya Sinaga, NIM 4183520011 (2022). Analisis Potensi Senyawa Bioaktif Minyak Esensial Akar dan Biji Hanjeli (*Coix lacryma-jobi* L.) Sebagai Antivirus SARS-CoV-2 secara *In Silico*.

Pandemi Covid-19 masih menjadi masalah yang serius, penyebaran virus dan mutasi virus yang sangat cepat menyebabkan penemuan obat yang spesifik masih kurang efektif. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui profil senyawa bioaktif yang terkandung dalam minyak esensial akar dan biji hanjeli, khususnya senyawa yang bermanfaat sebagai antivirus. Jenis dari penelitian ini adalah penelitian deskriptif dengan metode *in silico*. Sampel akar dan biji hanjeli diolah dengan cara destilasi uap air. Setelah itu identifikasi senyawa bioaktif dilakukan menggunakan teknik GC-MS. Selanjutnya hasil senyawa bioaktif yang telah didapat kemudian diidentifikasi bioaktivitasnya dengan menggunakan software PubChem, untuk melihat bioaktivitas dari senyawa tersebut dan terakhir dilakukan analisis dengan PASS online. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa bioaktif minyak esensial akar dan biji hanjeli terdiri dari 40 senyawa yang terdapat pada minyak esensial akar hanjeli dan 41 senyawa lagi berada di minyak esensial biji hanjeli dengan 19 senyawa merupakan senyawa bioaktif yang terdapat pada keduanya, sehingga didapati total sebesar 62 senyawa fitokimia yang berbeda-beda. Senyawa yang berpotensi sebagai antivirus ada sebanyak 12 senyawa. Distribusinya 3 senyawa pada minyak esensial akar hanjeli yakni: dodecanoic acid, tetradecanoic acid, dan myristic acid. Pada minyak esensial biji ditemukan 9 senyawa yang memiliki bioaktivitas sebagai antivirus yakni octanoic acid, n-decanoic acid, dodecanoic acid, tetracanoic acid, hexacanoic acid, n-hexacanoic acid, dodecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester, 9-octadecenoic acid,(E), dan oleic acid. Mekanisme kerja senyawa yang berpotensi sebagai antivirus umumnya sama, dimana setelah diidentifikasi pada software PASS online terdapat 2 mekanisme yakni sebagai RdRp (RNA-Dependent RNA Polymerase) inhibitor dan sebagai 3Clpro (3C-Like Protease) inhibitor

Kata Kunci: *Antivirus, GC-MS, Hanjeli, In silico, Minyak esensial.*

ABSTRACT

Accong Jaya Sinaga, NIM 4183520011 (2022). Analysis of Potential bioactive compounds of hanjeli root and seed essential oil as an antiviral SARS-CoV-2 with In silico method.

The Covid-19 pandemic is still a serious problem, the spread of the virus and the rapid mutation of the virus causes the discovery of specific drugs to be less effective. This study aims to determine the profile of bioactive compounds contained in hanjeli root and seed essential oils, especially compounds that are useful as antivirals. This type of research is descriptive research with In silico method. Hanjeli roots and seeds were processed by water-steam distillation. After that, the identification of bioactive compounds is carried out using GC-MS techniques. Furthermore, the results of bioactive compounds that have been obtained are then identified for bioactivity using PubChem software, and finally analyzed with PASS online to search their potential and mechanism as SARS-CoV-2 antiviral. The results showed that the bioactive compounds of hanjeli root and seed essential oils consisted of 40 compounds contained in hanjeli root essential oil and 41 more compounds in hanjeli seed essential oil. The total number of compounds is 81 with 19 compounds are bioactive compounds found in both, so that a total of 62 different phytochemical compounds are obtained. Bioactive compounds of hanjeli root essential oil which are useful as antivirals are 3 compounds, namely as dodecanoic acid, tetradecanoic acid, dan myristic acid. In the seed essential oil, 9 compounds were found to have bioactivity as antivirals such as octanoic acid, n-decanoic acid, dodecanoic acid, tetracanoic acid, hexacanoic acid, n-hexacanoic acid, dodecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester, 9-octadecenoic acid, (E)-, dan oleic acid. The mechanism of action of compounds that have potential as antivirals is generally the same, where after being identified in the PASS online software there are 2 mechanisms, known as RdRp (RNA-Dependent RNA Polymerase) inhibitors and as 3Clpro (3C-Like Protease) inhibitors.



Keywords: *Antivirus, Essential oil, GC-MS, Hanjeli, In silico.*