

## ABSTRAK

### ISOLASI DAN IDENTIFIKASI SENYAWA METABOLIT SEKUNDER DARI DAUN SUNGKAI (*Peronema canescens* Jack) SERTA STUDI POTENSI ANTIVIRUS *CORONAVIRUS DISEASE* 2019 (COVID-19) SECARA *IN SILICO*

Oleh

Uswatun Khasanah

Tumbuhan *Peronema canescens* Jack (*P. canescens*) merupakan salah satu spesies dari famili Verbenaceae yang dikenal dengan nama sungkai. Tumbuhan sungkai merupakan salah satu tanaman obat tradisional Indonesia yang dikenal karena daunnya dapat digunakan sebagai antibakteri, antimalaria, dan antiinflamasi. Penelitian ini bertujuan untuk mengisolasi dan mengidentifikasi senyawa metabolit sekunder dari daun sungkai serta kajian potensi antivirus COVID-19 senyawa hasil isolasi secara *in silico*.

Tahapan penelitian yang dilakukan meliputi pengambilan sampel dan persiapan sampel, ekstraksi menggunakan metode maserasi dan partisi cair-cair, serta proses pemisahan dan pemurnian dengan menggunakan metode kromatografi cair vakum dan kromatografi kolom. Senyawa yang berhasil diisolasi berupa kristal putih (NV20) dan kristal kuning pucat (NV21) masing-masing sebanyak 20,3 mg dan 4,0 mg. Identifikasi struktur senyawa hasil isolasi dilakukan dengan menggunakan spektroskopi <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR, dan NMR 2D meliputi HMBC dan HMQC. Berdasarkan analisis data spektroskopi, senyawa NV21 merupakan senyawa baru golongan flavonoid jenis flavonon yang memiliki rumus molekul C<sub>18</sub>H<sub>16</sub>O<sub>7</sub> dengan nama struktur 5,2'-dihidroksi-7,8,4'-trimetoksiflavon, sedangkan senyawa NV20 belum dapat diperkirakan struktur yang mungkin. Analisis lebih lanjut seperti spektrometri massa diperlukan untuk mengkonfirmasi struktur NV21 secara tepat dan memprediksi kemungkinan struktur NV20.

Kajian doking dilakukan pada senyawa NV21 sebagai ligan uji menggunakan *software AutoDock* yaitu *AutoDock 4* dan *AutoDock vina*. Hasil studi doking menunjukkan bahwa energi ikatan antara senyawa NV21 dengan

protein lebih besar dibandingkan ligan kokristal yaitu -6,84 kkal/mol dengan nilai konstanta inhibisi sebesar 12,64  $\mu$ M. Sedangkan hasil doking menggunakan *AutoDock vina* diperoleh energi bebas gibbs ( $\Delta G$ ) antara senyawa NV21 dengan protein lebih besar dibandingkan ligan kokristal yaitu -6,66 kkal/mol. Nilai energi ikatan ligan uji bernilai negatif, artinya senyawa juga berhasil membentuk ikatan dengan SARS-CoV-2 Mpro. Sehingga nilai energi ikatan yang diperoleh dari studi doking tersebut menunjukkan bahwa ligan uji yang diperoleh dari daun sungkai memiliki potensi sebagai inhibitor enzim SARS-CoV-2 Mpro.

Kata kunci : Daun sungkai, flavonoid, *in silico*, *P. canescens*, SARS-CoV-2 Mpro, virus COVID-19