

Aktivitas Biologis Minyak Esensial Daun dan Biji Jamblang (*Syzygium cumini*) Dan Potensinya Sebagai Antivirus SARS-CoV-2 Secara *In Silico*

Biological Activity of Essential Oil of Jamblang Leaves and Seeds (Syzygium cumini) And its Potential As An Antiviral for SARS-CoV-2 In Silico

Sonia Fitriani¹⁾, Diky Setya Diningrat^{2*)}, Ayu Nirmala Sari³⁾, Novita Sari Harahap⁴⁾, Kusdianti⁵⁾

^{1,2*)} Jurusan Biologi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Medan, Medan, Indonesia

³⁾ Program Studi Biologi, Fakultas Sains dan Teknologi, UIN Ar-Raniry Banda Aceh, Indonesia

⁴⁾ Jurusan Ilmu Keolahragaan, Fakultas Ilmu Keolahragaan, Universitas Negeri Medan, Medan, Indonesia

⁵⁾ Jurusan Biologi, Fakultas Pendidikan Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Pendidikan Indonesia, Bandung, Indonesia

^{2*)} Corresponding Author e-mail: dikysd@unimed.ac.id

Abstrak

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi senyawa antivirus SARS-CoV-2 dari minyak esensial daun dan biji Jamblang (*Syzygium cumini*) beserta mekanisme antivirusnya terhadap SARS-CoV-2 dengan pendekatan *in silico*. Minyak daun dan biji jamblang diperoleh melalui proses destilasi. Minyak hasil destilasi kemudian di analisis menggunakan *Gas Chromatography Mass Spectrophotometer* (GC-MS). Hasil analisis GCMS dievaluasi menggunakan program MASSLAB. Data yang diperoleh dari alat GCMS kemudian dianalisis lanjut menggunakan software PubChem NCBI database dan PASS online. Hasil analisis GC-MS menunjukkan terdapat 45 senyawa bioaktif pada daun jamblang dan 69 senyawa bioaktif pada biji jamblang. Hasil analisis PubChem menunjukkan bahwa diperoleh sebanyak 10 senyawa yang memiliki aktivitas sebagai antiviral. Hasil analisis PASS online menunjukkan mekanisme antivirus sebagai *3Clpro inhibitor* (*3 C-like protease (Human coronavirus) inhibitor*). Hasil penelitian ini dapat dijadikan landasan dalam program pengembangan pemanfaatan potensi senyawa bioaktif pada minyak esensial daun dan biji jamblang sebagai antivirus. Pada penelitian selanjutnya perlu dilakukan analisis pada bagian tanaman yang lain dan melakukan perbandingan untuk melengkapi data base yang sudah tersedia.

Kata kunci: Antivirus, *In silico*, Jamblang (*Syzygium cumini*), SARS-CoV-2

Received: 30 November 2022

Accepted: 5 Februari 2023

©2023 Sonia Fitriani, Diky Setya Diningrat, Ayu Nirmala Sari, Novita Sari Harahap, Kusdianti Kusdianti

A. PENDAHULUAN

SARS-CoV-2 (*Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2*) adalah virus yang menyebabkan gangguan pada pernapasan. SARS-CoV-2 lebih dikenal dengan sebutan Coronavirus Disease 2019 (COVID-19). Kemunculan pertama penyakit ini dilaporkan sekitar akhir tahun 2019 dimana virus ini berasal dari Negara China, tepatnya daerah Wuhan, sedangkan penyebaran virus ini telah mencakup hampir ke seluruh Negara yang ada di dunia dan salah satunya adalah Indonesia (Sanders *et al.*, 2020). Virus ini menimbulkan gejala penyakit seperti gastroenteritis, bronchitis, penyakit sistemik, hepatitis, juga dapat menyebabkan kematian pada hewan seperti burung bahkan juga pada manusia (Septiana, 2020). Dengan keadaan wabah SARS-CoV-2 sekarang ini, sudah dilakukan beberapa usaha penemuan obat untuk penyakit ini. Salah satu usaha yang dilakukan yaitu dengan menemukan senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai antivirus SARS-CoV-2 dari senyawa bioaktif yang berasal dari bahan alam. Salah satu tumbuhan yang dimanfaatkan sebagai obat secara tradisional yaitu *Syzygium cumini* yang lebih dikenal dengan tanaman jamblang.

Jamblang merupakan tumbuhan dari suku jambu-jambuan. Jamblang termasuk tumbuhan tropis, sangat banyak tumbuh di Pakistan, India, Bangladesh, dan Indonesia. Di Indonesia seperti

di pulau Jawa, jamblang tumbuh liar di hutan jati, serta dimanfaatkan sebagai pohon buah di pekarangan. Sedangkan di Aceh, tanaman ini tersebar luas dan hanya dimanfaatkan sebagai bahan pangan atau sumber buah. Pemanfaatan tanaman jamblang dalam pengobatan tradisional sudah banyak digunakan. Studi praklinis menunjukkan bahwa daun, batang dan buah jamblang mempunyai aktivitas sebagai antioksidan, antibakteri, antikanker, anti inflamasi, antidiabetes, dan obat cacing (Haroon *et al.*, 2015).

Berbagai penelitian mengenai kandungan senyawa bioaktif pada tanaman jamblang menunjukkan adanya senyawa bioaktif yang terkandung pada tanaman ini. Ekstrak daun jamblang mengandung senyawa alkaloid, flavonoid, saponin, kuinon, tanin, steroid/terpenoid, dan polifenol (Marliani, Kusriani, *et al.*, 2014). Ekstrak biji jamblang mengandung senyawa alkaloid, flavonoid, saponin, kuinon, tanin, steroid/terpenoid, dan polifenol (Marliani, Sari, *et al.*, 2014). Tanin atau asam tanat ditemukan di beberapa tanaman salah satunya pada *Syzygium cumini*, senyawa ini dikenal karena bersifat antivirus (CoVs, RSV, Polio, HIV, HSV), antioksidan, anti-inflamasi, anti-karsinogenik, analgesik dan sifat antimikroba (Tazeen *et al.*, 2021). Beberapa flavonoid juga diidentifikasi sebagai agen antivirus potensial terhadap SARS-CoV-2. Sementara itu, penelitian mengenai minyak atsiri daun jamblang dilaporkan memiliki senyawa yang dapat berinteraksi dengan reseptor ACE2, sehingga senyawa minyak atsiri daun jamblang dapat direkomendasikan untuk pengembangan lebih lanjut sebagai kandidat obat antivirus (Diningrat *et al.*, 2021). Berdasarkan hal tersebut, tanaman jamblang (*Syzygium cumini*) memiliki potensi sebagai antivirus herbal. Oleh karena itu, perlu dilakukan penelitian kandungan senyawa bioaktif pada organ tanaman jamblang sebagai alternatif antivirus dari bahan alam.

Dalam melakukan analisis senyawa bioaktif pada tumbuhan, perlu dilakukan proses ekstraksi terlebih dahulu. Salah satu metode ekstraksi yang biasa dilakukan adalah destilasi. Destilasi merupakan proses penarikan senyawa yang ikut menguap dengan air sebagai pelarutnya untuk mendapatkan minyak esensial dari suatu tumbuhan. Metode destilasi menjadi metode yang sering digunakan dalam pembuatan minyak esensial karena kemudahan dan keefisienannya. Kemudian untuk menganalisis kandungan senyawa bioaktif yang terkandung di dalam minyak esensial, dilakukan analisis menggunakan GC-MS (*Gas Chromatography-Mass Spectrophotometry*). GC-MS merupakan proses dari kromatografi gas yang merupakan proses pendeteksi zat/senyawa yang mudah menguap, sedangkan spektrometri massa yang merupakan proses identifikasi senyawa melalui bobot molekul serta menentukan rumus molekulnya, sehingga senyawa dapat teridentifikasi lebih detail dibandingkan dengan metode lain. Oleh sebab itu, metode ini sangat sesuai untuk minyak esensial yang bersifat volatil (mudah menguap) (Darmapatni *et al.*, 2016).

Minyak esensial adalah salah satu metabolit sekunder dari tanaman yang berbentuk minyak dengan karakteristik yaitu mudah menguap (*volatile*). Minyak esensial memiliki kandungan senyawa bioaktif yang dapat bermanfaat dan memberikan potensi dalam kesehatan. Pemanfaatan minyak atsiri sangat luas mulai dari kosmetika, parfum, industri makanan dan minuman, sampai industri obat-obatan, termasuk antivirus (Julianto, 2016). Menurut Ma & Yao (2020), minyak atsiri terbukti aktif melawan berbagai macam virus, seperti virus influenza (IFV), virus herpes manusia (HSV), virus imunodefisiensi manusia (HIV), virus demam kuning, dan flu burung. Selain itu, penelitian lain menyatakan bahwa kandungan senyawa minyak esensial bawang putih mampu menghambat protein ACE2, menyebabkan virus kehilangan reseptor inang dan pada saat yang bersamaan menyerang protein PDB6LU7, yang merupakan protease utama SARS-CoV-2 (Thuy *et al.*, 2020).

Seiring berkembangnya ilmu pengetahuan dan teknologi, penelitian di bidang medis dan obat-obatan semakin modern. Penelitian menggunakan hewan uji semakin sulit disebabkan dalam pengerjaannya memerlukan waktu dan biaya yang tidak sedikit serta adanya kode etik terhadap penggunaan hewan uji. Oleh sebab itu, *in silico* mulai dilirik karena kelebihannya yang hemat biaya dan hasilnya lebih cepat serta resiko kegagalan yang rendah. Istilah *in silico* digunakan untuk menggambarkan eksperimen yang menggunakan perangkat lunak komputer dan database untuk mempelajari sifat fisikokimia, struktur senyawa maupun interaksi antar molekul. Studi *in*

silico dapat digunakan untuk mengetahui interaksi suatu senyawa dengan molekul target, diantaranya ialah reseptor. Interaksi antara senyawa dengan reseptor dapat divisualisasikan dengan metode komputasi serta dapat digunakan untuk mengetahui farmakofor dari suatu senyawa (Setiawan & Istyastono, 2015). Metode ini dapat dimanfaatkan untuk uji pendahuluan dalam menemukan berbagai obat baru serta metode ini dinilai lebih efisien karena tidak memerlukan waktu pengerjaan yang lama dan biaya yang besar (Nursamsiar *et al.*, 2016). Pada penelitian ini, digunakan dua jenis software dalam analisis *in silico* yaitu software PubChem dan software PassOnline.

Berdasarkan hal-hal diatas, terkandung senyawa bioaktif dalam tanaman jamblang, namun belum diketahui senyawa bioaktif yang terkandung dalam minyak esensial daun dan biji Jamblang, sehingga perlu dilakukan analisis senyawa bioaktif pada minyak esensial daun dan biji jamblang. Juga belum ditemukan mekanisme antivirus teradap SARS-CoV-2 dari minyak esensial daun dan biji jamblang, sehingga perlu dilakukan analisis lanjutan terkait senyawa yang berpotensi sebagai antivirus SARS-CoV-2 serta mekanisme antivirusnya terhadap SARS-CoV-2 dari senyawa bioaktif minyak esensial daun dan biji jamblang.

B. METODE PENELITIAN

Rancangan atau desain pada penelitian ini adalah desain penelitian eksperimental melalui pendekatan *In silico* yang merupakan suatu metode eksperimen menggunakan perangkat lunak komputer untuk mempelajari

Alat Dan Bahan

Alat-alat yang digunakan dalam penelitian ini yaitu timbangan, gunting, neraca analitik, botol sampel, wadah/toples kaca bening, kompor gas, Alat destilasi, pipet tetes, alat GC-MS, kertas label, spidol, tisu, kain lap, kamera, beberapa alat tulis, dan komputer (laptop). Bahan-bahan yang digunakan dalam penelitian ini yaitu aquadest, es batu, daun jamblang dan biji jamblang.

bioaktivitas senyawa fitokima minyak esensial daun dan biji jamblang.

Prosedur Kerja

Pembuatan Minyak Esensial Daun dan Biji Jamblang. Pembuatan minyak esensial daun dan biji jamblang dengan menggunakan metode destilasi uap. Teknik pemrosesannya dengan menggunakan alat destilator yang menggunakan sistem uap dan air. Peralatan utama terdiri dari tiga bagian yaitu destilator, kondensor dan bak penampung air pendingin. Kondensor terdiri dari sebuah termos es dimana pada bagian dalamnya terdapat pipa berbentuk spiral yang dilewati uap dari destilator. Seluruh peralatan dibuat dari bahan stainless steel, kecuali bak pendinginnya menggunakan ember plastik agar suhunya tetap dingin. Bahan bakar yang digunakan adalah kompor dan proses destilasi menggunakan pendingin air (es batu).

Steam melewati tumpukan daun/biji jamblang dan membawa minyak yang terdapat dalam daun/biji jamblang. Steam yang membawa minyak esensial dari daun/biji jamblang kemudian didinginkan. Proses pendinginan berlangsung dalam kondensor. Steam melewati pipa spiral didalam kondensor dan pada bagian luar pipa spiral didinginkan menggunakan es batu dari bak penampung air pendingin. Steam yang sudah didinginkan berubah menjadi kondensat. Pendinginan air dalam bak penampung air pendingin berlangsung secara alami. Temperatur air pendingin yang dibutuhkan untuk proses kondensasi adalah 25o – 30oC. Steam keluar sebagai kondensat dan minyak daun/biji jamblang dipisahkan dari kondensat menggunakan corong pemisah. Dalam proses destilasi uap semakin besar laju alir steam maka difusi uap pada permukaan bahan baku semakin baik dan menyebabkan hasil minyak esensial menjadi optimal (Ma'sum & Proborini, 2016).

Analisis GCMS. Teknik GC-MS digunakan untuk mengidentifikasi senyawa fitokimia yang terkandung dalam suatu tumbuhan. GC-MS merupakan proses dari kromatografi gas yang merupakan proses pendeteksi zat/senyawa yang mudah menguap, sedangkan spektrofotometer

massa yang merupakan proses identifikasi senyawa melalui bobot molekul serta menentukan rumus molekulnya. Metode GC-MS sangat sesuai untuk minyak esensial yang bersifat volatil (mudah menguap) (Darmapatni *et al.*, 2016).

Sebelum benar-benar dioperasikan, instrumen diperiksa aliran gasnya dimulai dengan kecepatan alir yang rendah dengan membuka katup utama dan sekunder pada tangki gas pembawa hingga menunjukkan jarum 15 psi, hal ini memungkinkan aliran gas pembawa 2-5 mL/menit untuk kolom paking atau 0,5 mL/menit untuk kolom kapiler. Kolom dipanaskan hingga suhu awal yang dikehendaki, suhu detektor diatur 10-25°C lebih tinggi dari suhu kolom, demikian juga suhu injection port.

Kecepatan (laju) aliran gas kemudian dinaikkan hingga 25-30 ml/menit kolom paking atau hingga dicapai kecepatan alir gas optimum. Bila digunakan Detektor ionisasi nyala perlu diperhatikan adanya gas hidrogen dan udara yang mengalir ke detektor tersebut. Sampel dilarutkan dalam pelarut yang mudah menguap, volume sampel yang diinjeksikan tergantung jenis detektor yang digunakan. (TCD=>10 µl, FID= 1-10µl), BCD =0,1-5 µl. dengan micro syringe) Selama elusi yaitu selama perjalanan sampel dari injection port hingga detektor Signal dari detektor ini akan direkam sebagai kromatogram pada recorder sederhana atau yang diolah mikroprosesor ditampilkan pada layar moneter. Pada kromatogram yang ditampilkan oleh mikroprosesor sekaligus dapat diketahui kadar tiap komponen.

Teknik Analisis Data

Data yang diperoleh dari hasil penelitian ini merupakan data kualitatif yang dianalisis secara deskriptif dalam bentuk tabel dan gambar. Data kualitatif meliputi hasil identifikasi senyawa bioaktif minyak esensial daun dan biji jambang yang diperoleh dari kromatogram hasil GC-MS. Informasi yang diperoleh kemudian akan dianalisis menggunakan program software PubChem untuk mengetahui bioaktivitas senyawa tersebut dan canonical smiles yang digunakan sebagai kode analisis lanjutan dengan software Pass online untuk mengetahui senyawa yang berpotensi sebagai antivirus beserta mekanisme antivirus SARS-CoV-2 dari senyawa antivirus. PubChem berisi informasi secara luas berbagai entitas kimia dan juga merupakan gudang informasi yang dipakai untuk menemukan data tentang zat senyawa serta peran biologisnya (Kim *et al.*, 2016). PASS online (*Prediction of Activity Spectra for Substances*) adalah software berbasis PC yang digunakan untuk memprediksi aktivitas biologis dari suatu senyawa. Analisis dengan PASS sudah banyak dilakukan yaitu 205.000 senyawa dan hasilnya mempunyai lebih dari 3.750 aktivitas biologis (Pramely & Raj, 2012).

C. HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil Ekstraksi Minyak Atsiri Jambang

Hasil destilasi minyak esensial daun dan biji jambang dengan menggunakan waktu kurang lebih selama 8 jam dengan bagian tanaman sebelumnya dikeringkan sampai kandungan airnya dirasa sudah benar-benar habis. Hal ini bertujuan agar hasil yang didapat atau tujuan untuk mendapatkan minyak esensial tersebut semakin optimal. Hasil minyak esensial daun jambang yang di dapat adalah 4,82mL/4kg, sedangkan minyak esensial biji jambang yang didapatkan sebanyak 3,27mL/3kg.



Gambar 1. Hasil Destilasi Minyak Esensial Daun dan Biji Jambang

Hasil Uji GCMS Minyak Esensial Daun Dan Biji Jamblang

Hasil analisis GCMS dari ekstrak minyak esensial daun Jamblang menunjukkan prediksi senyawa terkandung sejumlah 45 senyawa. Diantara 45 senyawa yang memiliki puncak waktu retensi tertinggi pada puncak 10,06 m/z, dan retensi terendah 4,32 m/z. Berikut ini merupakan tabel hasil analisis GC-MS (*Gas Chromatography-Mass Spectrometry*) minyak esensial daun Jamblang.

Tabel 1. Hasil Analisis Minyak Esensial Daun Jamblang

No.	RT	Persentase Quality (%)	Library/ID
1.	4.32	94	4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-
		87	4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-di hydroxy-6-methyl- 2,3-Dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-4H-pyran-4-one
2.	4.95	38	Benzofuran, 2,3-dihydro-
			Methyl trans-3-chloropropenoate
			Benzofuran, 2,3-dihydro-
3.	5.04	90	5-Hydroxymethylfurfural
			2-Furaldehyde, 5-(hydroxymethyl)- 2-Furaldehyde, 5-(hydroxymethyl)-
4.	5.89	30	1-naphthalenol
		25	2-Methoxy-4-vinylphenol
			6-Quinolinamine
5.	6.42	91	1,2,3-Benzenetriol
			1,2,3-Benzenetriol
			1,2,3-Benzenetriol
6.	7.50	59	Aromandendrene
			1,1,7-TRIMETHYL-4-METHYLENEDECAHYD CYCLOPROPA[E]AZULENE RO-1H-
		53	1,1,7-TRIMETHYL-4-METHYLENEDECAHYD CYCLOPROPA[E]AZULENE RO-1H-
7.	7.65	55	1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-3,3,5,6-tetramethyl- 1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-3,3,5,6-tetramethyl-
		53	Pyridine, 1,2,3,6-tetrahydro-1-methyl-4-phenyl-
8.	8.31	50	DL-Arabinitol
			L-Arabinitol
			DL-Arabinitol
9.	8.34	50	DL-Arabinitol
		49	Methyl-.beta.-D-arabinopyranoside
10.	8.37	92	5-Azulenemethanol, 1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-.alpha.,.alpha.,3,8-tetramethyl-, [3S-(3.alpha.,5.alpha.,8.alpha.)]- Guaiol
		91	Guaiol
11.	8.47	53	Methyl .beta.-d-galactopyranoside Methyl-.beta.-D-thiogalactoside
		50	3,4-Altrosan
12.	8.79	42	5-Hepten-3-one, 2-(5-ethenyltetrahydro-5-methyl-2-furanyl)-6-methyl-, [2S- [2.alpha.(R*),5.alpha.]]-
			5-Hepten-3-one, 2-(5-ethenyltetrahydro-5-methyl-2-furanyl)-6-methyl-, [2S- [2.alpha.(R*),5.alpha.]]-
			5-Hepten-3-one, 2-(5-ethenyltetrahydro-5-methyl-2-furanyl)-6-methyl-, [2S- [2.alpha.(R*),5.alpha.]]-
13.	8.85	98	2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,8a-octahydro-.alpha.,.alpha.,4a,8- tetramethyl-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8a.beta.)]-
		95	2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydro-.alpha.,.alpha.,4a,8- tetramethyl-, (2R-cis)-
			2-(4A,8-DIMETHYL-1,2,3,4,4A,5,6,8A-OCTAHYDRO-2- NAPHTHALENYL)-2-PROPANOL

14.	9.81	64	(5R,8aR)-5-Propyloctahydroindolizine
		59	(9Z)-3-Propyl-octahydro-indolizine
			(9E)-3-Propyl-octahydro-indolizine
15.	10.06	93	(1R,4aR,7R,8aR)-7-(2-Hydroxypropan-2-yl)-1,4a-dimethyldecahydronaphthalen-1-ol
		90	7-(2-Hydroxypropan-2-yl)-1,4a-dimethyldecahydronaphthalen-1-ol
		64	2-Naphthalenemethanol, decahydro-.alpha.,.alpha.,4a-trimethyl-8-methylene-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8a.beta.)]-

Tabel 1. menunjukkan hasil analisis GC-MS senyawa fitokimia yang teridentifikasi pada ekstraksi minyak esensial daun jambang sebanyak 15 Pk senyawa fitokimia yang di mulai dari 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl- dengan waktu retensi terendah 4.32 sampai yang terakhir yaitu 2-Naphthalenemethanol, decahydro-.alpha.,.alpha.,4a-trimethyl-8-methylene-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8a.beta.)]- dengan waktu retensi tertinggi 10.06.

Berikut ini merupakan tabel hasil analisis GC-MS (Gas Chromatography-Mass Spectrometry) minyak esensial daun Jambang.

Tabel 2. Hasil Analisis Minyak Esensial Biji Jambang

Pk	RT	Persentase Quality (%)	Library/ID
1	3.47	27	Ethanamine, N-ethyl-N-nitroso-
		22	Aziridine-2-carbothioamide
			CIS NONENE-3
2	3.49	78	Valeric acid, 4-chlorophenyl ester
		72	Furaneol
			2,5-Dimethylfuran-3,4(2H,5H)-dione
3	3.70	50	D-Alanine, N-propargyloxycarbonyl-, dodecyl ester
			4,5-Diamino-2-hydroxypyrimidine
			Thymine
4	3.80	64	Furyl hydroxymethyl ketone
			2-Furancarboxylic acid, methyl ester
			3-Furancarboxylic acid, methyl ester
5	4.25	72	Ethanamine, N-ethyl-N-nitroso-
			Ethanamine, N-ethyl-N-nitroso-
		56	2-Propanamine, N-methyl-N-nitroso-
6	4.35	94	4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-
		86	2,3-Dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl -4H-pyran-4-one
			4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-
7	4.17	81	4H-Pyran-4-one, 3,5-dihydroxy-2-methyl-
		64	4H-Pyran-4-one, 3,5-dihydroxy-2-methyl-
			4H-Pyran-4-one, 3,5-dihydroxy-2-methyl-
8	5.17	91	2-Furaldehyde, 5-(hydroxymethyl)-
		90	5-Hydroxymethylfurfural
		86	2-Furaldehyde, 5-(hydroxymethyl)-
9	5.30	55	5-Hydroxymethylfurfural
		49	2-Furaldehyde, 5-(hydroxymethyl)-
		46	2-FURANCARBOXALDEHYDE, 5-(HYDROXYMETHYL)-
10	5.68	38	4,6-dihydrothieno[3,4-b]furan
		25	cis-1-Ethyl-3-methyl-cyclohexane
			2-Hexenal, 2-ethyl-
11	5.82	53	2H-Pyran, 2-ethyl-5,6-dihydro-4-methyl-
		47	4-Mercaptophenol
		46	Thienylethanal
12	5.95	38	Glutaric acid, 2-naphthyl nonyl ester
			Glutaric acid, heptyl 2-naphthyl ester
			Glutaric acid, hept-2-yl 1-naphthyl ester
13	6.55	64	Succinic acid, 3-methylbut-2-yl 3-heptyl ester
		43	Succinic acid, 2-ethylhexyl but-2-en-1-yl ester
		38	Heptyl (E)-2-methylbut-2-enoate

14	6.68	46	4H-Pyran-4-one, 3-hydroxy-2-methyl Pyrazole-5-carboxylic acid, 3-methyl-
		43	1,2,4-Benzenetriol
15	7.25	38	1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol
		27	tetradecamethyl-cyclo-hepta-siloxane
		25	3-Butynyl 4-(N-methylacetamido)benzenesulfonate
16	7.36	38	5,12-Naphthacenedione, 10-(3-(3-cyano-4 morpholinyl)-2,3,6- trideoxy-.alpha.-L-lyxo-hexopyranosyl)oxy)7,8,9,10-tetrahydro-6,8,11-trihydroxy-8-(hydroxyacetyl)-1-methoxy-, (8S-cis)-
		25	Ethanamine, N-(ethoxymethyl)-N-ethyl- Ethanamine, N-(ethoxymethyl)-N-ethyl-
17	8.51	47	1,6-Anhydro-.alpha.-d-galactofuranose
		43	D-glycero-D-gulo-Heptonic acid, .delta.-lactone
		38	4-O-HEXOPYRANOSYLHEXOPYRANOSE
18	8.71	35	Norepinephrine, (R)-, 4TMS derivative
		27	Butanoic acid, 3-oxo-, 1-methylethyl ester
		14	BUTANOIC ACID, 2-METHYL-, ETHYL ESTER
19	8.80	46	.beta.-D-Glucopyranose, 4-O-.beta.-D-galactopyranosyl-
		38	4-O-HEXOPYRANOSYLHEXOPYRANOSE Sucrose
20	9.93	87	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-
		80	OCTADECAMETHYLCYCLONONASILOXANE Cyclononasiloxane, octadecamethyl-
21	11.00	90	4-[[4-(4-BROMO-PHENYL)-THIAZOL-2-YL]-METHYL-AMINO]- BUTYRIC ACID
		87	SILICONE OIL
		62	Cyclononasiloxane, octadecamethyl-
22	11.97	64	6-Aza-5,7,12,14-tetrathiapentacene
		47	N-(4'-Chlorophenyl)-8-fluoro-3-methyl-isoalloxazine
		46	Cyclodecasiloxane, eicosamethyl-
23	13.98	22	2-Aminoacetic acid, N-diphenylmethylene-, methyl ester
		18	(3A,10A-DIHYDROXY-2,10-DIMETHYL-3,8-DIOXO- 3,3A,4,6A,7,8,9,10,10A,10B-DECAHYDROBENZO[E]AZULEN-5- YL)METHYL ACETATE
		16	[3,3-DIMETHYL-1-(2-PHENYLETHYL)-4- PENTENYL]BENZENE

Table C.2 menunjukkan bahwa jumlah senyawa fitokimia yang terdapat pada minyak esensial biji jambang sebanyak 23 pk yang dimulai dari Ethanamine, N-ethyl-N-nitroso- dengan waktu retensi terendah 3.47 sampai yang terakhir [3,3-DIMETHYL-1-(2-PHENYLETHYL)-4-PENTENYL]BENZENE dengan waktu retensi tertinggi 13.98.

Identifikasi Senyawa Antivirus Hasil GCMS

Analisis *In silico* atau analisa bioinformatika umum dipakai untuk melakukan analisa perancangan suatu bahan aktif yang berpotensi sebagai obat dengan menggunakan komputer/komputerisasi melalui tahap seleksi dan karakterisasi molekul target, visualisasi struktur molekul target, dan merancang mekanisme hubungan molekul obat atau senyawa kimia didasarkan pada molekul target. Perangkat analisa yang digunakan adalah software online PubChem (<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>), dan software Passonline. Kemudian dilakukan analisa tersebut diperoleh dari data NCBI yang merupakan library atau perpustakaan senyawa-senyawa kimia yang diakui internasional.

Identifikasi senyawa hasil GCMS yang meliputi sifat-sifat senyawa struktur molekul dan untuk mendapatkan canonical smile yang berfungsi sebagai kode untuk analisa lanjutan dan lain-lain menggunakan software online PubChem.

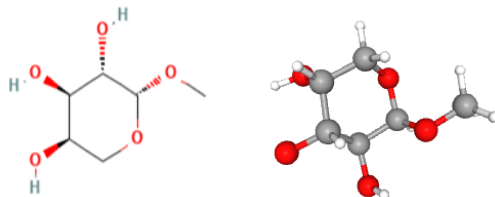
1. Hasil Analisis Bioaktivitas Antivirus Minyak Esensial Daun Jamblang

a) Methyl-.beta.-D-arabinopyranoside

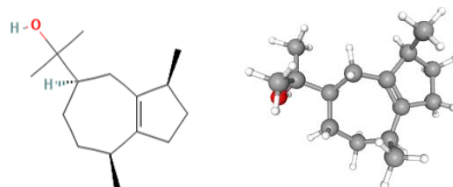
Senyawa ini mempunyai PubChem CID 6102754 dengan nama IUPAC (2R,3S,4R,5R)-2-methoxyoxane-3,4,5-triol, dan mempunyai nama lain Methyl-beta-D-arabinopyranoside Methyl beta-D-arabinopyranoside, Methyl b-D-arabinopyranoside, dan (2R,3S,4R,5R)-2-Methoxytetrahydro-2H-pyran-3,4,5-triol. Canonical SMILES senyawa ini adalah COC1C(C(C(O1)O)O)O. Mempunyai rumus molekul $C_6H_{12}O_5$ dan struktur kimianya.

b) Guaiol

Senyawa ini mempunyai PubChem CID 227829 dengan nama IUPAC 2-[(3S,5R,8S)-3,8-dimethyl-1,2,3,4,5,6,7,8-octahydroazulen-5-yl]propan-2-ol, dan mempunyai nama lain Guaiol, 489-86-1, Champacol, Guaiac alcohol, dan (-)-Guaiol. Canonical SMILES senyawa ini adalah CC1CCC(CC2=C1CCC2C)C(C)(C)O. Mempunyai rumus molekul $C_{15}H_{26}O$ dan struktur kimianya.



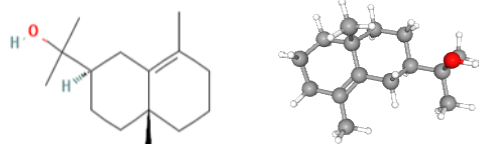
Gambar 2. Struktur Methyl-.beta.-D-arabinopyranoside



Gambar 3. Struktur Guaiol

c) 2-Naphthalenemethanol,1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydro.alpha.,.alpha.,4a,8-tetramethyl-, (2R-cis)-

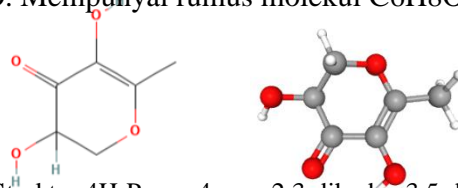
Senyawa ini mempunyai PubChem CID 6432005 dengan nama IUPAC 2-[(2R,4aR)-4a,8-dimethyl-2,3,4,5,6,7-hexahydro-1H-naphthalen-2-yl]propan-2-ol, dan mempunyai nama lain gamma-Eudesmol, Machilol, Selinenol, Uncineol, dan 1209-71-8. Canonical SMILES senyawa ini adalah CC1=C2CC(CCC2(CCC1)C)C(C)(C)O. Mempunyai rumus molekul $C_{15}H_{26}O$ dan struktur kimianya.



Gambar 4. Struktur 2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydro-.alpha.,.alpha.,4a,8-tetramethyl-, (2R-cis)-

d) 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-

Senyawa ini mempunyai PubChem CID 119838 dengan nama IUPAC 3,5-dihydroxy-6-methyl-2,3-dihydropyran-4-one, dan mempunyai nama lain 4H-pyran-4-one,2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-, 3,5-dihydroxy-6-methyl-2,3-dihydro-4H-pyran-4-one, dan 3,5-dihydroxy-6-methyl-2,3-dihydropyran-4-one. Canonical SMILES senyawa ini adalah CC1=C(C(=O)C(CO1)O)O. Mempunyai rumus molekul $C_6H_8O_4$ dan struktur kimianya.

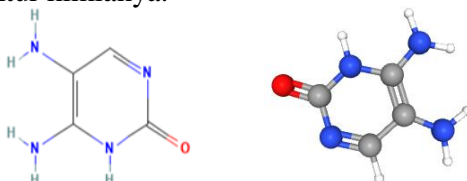


Gambar 5. Struktur 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-

2. Hasil Analisis Bioaktivitas Antivirus Minyak Esensial Biji Jamblang

a) 4,5-Diamino-2-hydroxypyrimidine

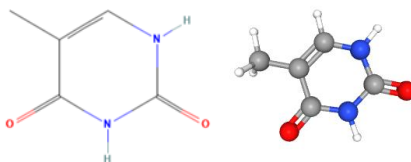
Senyawa ini mempunyai PubChem CID 248637 dengan nama IUPAC 5,6-diamino-1H-pyrimidin-2-one, dan mempunyai nama lain 4,5-Diaminopyrimidin-2-ol, 23899-73-2, 5-aminocytosine, 4,5-DIAMINO-1,2-DIHYDROPYRIMIDIN-2-ONE, dan 4,5-diaminopyrimidin-2(1H)-one. Canonical SMILES senyawa ini adalah C1=NC(=O)NC(=C1N)N. Mempunyai rumus molekul $C_4H_6N_4O$ dan struktur kimianya.



Gambar 6. Struktur 4,5-Diamino-2-hydroxypyrimidine

b) Thymine

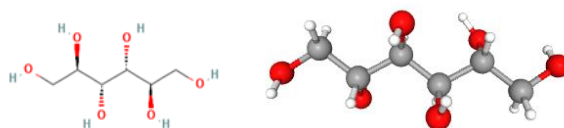
Senyawa ini mempunyai PubChem CID 1135 dengan nama IUPAC 5-methyl-1H-pyrimidine-2,4-dione, dan mempunyai nama lain thymine, 5-methyluracil, 65-71-4, 2,4-Dihydroxy-5-methylpyrimidine, dan Thymin. Canonical SMILES senyawa ini adalah CC1=CNC(=O)NC1=O. Mempunyai rumus molekul $C_5H_6N_2O_2$ dan struktur kimianya.



Gambar 7. Struktur Thymine

c) 1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol

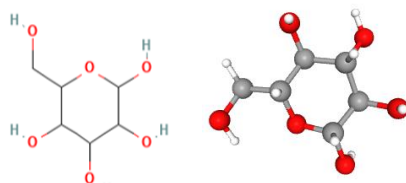
Senyawa ini mempunyai PubChem CID 6251 dengan nama IUPAC (2R,3R,4R,5R)-hexane-1,2,3,4,5,6-hexol, dan mempunyai nama lain D-mannitol, mannitol, 69-65-8, Mannite, dan Osmitol. Canonical SMILES senyawa ini adalah C(C(C(C(C(CO)O)O)O)O)O. Mempunyai rumus molekul $C_6H_{14}O_6$ dan struktur kimianya.



Gambar 8. Struktur 1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol

d) 4-O-Hexopyranosylhexopyranose

Senyawa ini mempunyai PubChem CID 206 dengan nama IUPAC 6-(hydroxymethyl)oxane-2,3,4,5-tetrol, dan mempunyai nama lain Hexopyranose, 6-(hydroxymethyl)oxane-2,3,4,5-tetrol, hexopyranoside, 42752-07-8, dan D-(+)-Mannose. Canonical SMILES senyawa ini adalah C(C1C(C(C(C(O1)O)O)O)O)O. Mempunyai rumus molekul $C_6H_{12}O_6$ dan struktur kimianya.

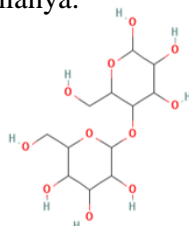


Gambar 9. Struktur 4-O-HEXOPYRANOSYLHEXOPYRANOSE

e) .beta.-D-Glucopyranose, 4-O-.beta.-D-galactopyranosyl-

Senyawa ini mempunyai PubChem CID 294 dengan nama IUPAC 2-(hydroxymethyl)-6-[4,5,6-trihydroxy-2-(hydroxymethyl)oxan-3-yl]oxyoxane-3,4,5-triol, dan mempunyai nama lain

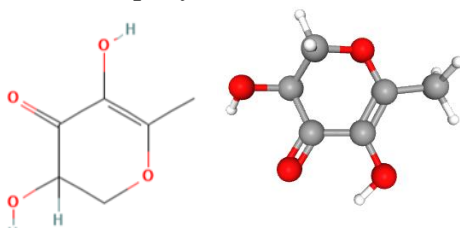
cellobiose, maltose, D-(+)-Cellobiose, Lactose, dan alpha-, Lactose, .beta.-. Canonical SMILES senyawa ini adalah C(C1C(C(C(C(O)OC2C(OC(C(C2O)O)O)CO)O)O)O)O. Mempunyai rumus molekul $C_{12}H_{22}O_{11}$ dan struktur kimianya.



Gambar 10. Struktur .beta.-D-Glucopyranose, 4-O-.beta.-D-galactopyranosyl-

f) 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-

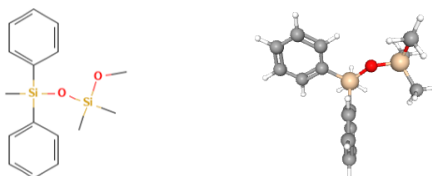
Senyawa ini mempunyai PubChem CID 119838 dengan nama IUPAC 3,5-dihydroxy- 6-methyl-2,3-dihydropyran-4-one, dan mempunyai nama lain 4H-pyran-4-one,2,3-dihydro- 3,5-dihydroxy-6-methyl-, 3,5-dihydroxy-6-methyl-2,3-dihydro-4H-pyran-4-one, dan 3,5- dihydroxy-6-methyl-2,3-dihydropyran-4-one. Canonical SMILES senyawa ini adalah CC1=C(C(=O)C(CO1)O)O. Mempunyai nama kimia $C_6H_8O_4$ dan struktur kimianya.



Gambar 11. Struktur 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-

g) Silicone Oil.

Senyawa ini mempunyai PubChem CID 121233058 dengan nama IUPAC methoxy-dimethyl-[methyl(diphenyl)silyl]oxysilane, dan mempunyai nama lain 68083-14-7, Methoxy-dimethyl-[methyl(diphenyl)silyl]oxysilane, MFCD00148388, Dimethyl diphenyl siloxanes and silicones, CID 121233058, dan Silicone Oil. Canonical SMILES senyawa ini adalah CO[Si](C)(C)O[Si](C)(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2. Mempunyai rumus molekul $C_{16}H_{22}O_2Si_2$ dan struktur kimianya.



Gambar 12. Struktur Silicone Oil

Identifikasi Senyawa Antivirus Hasil GCMS

PASS online (*Prediction of Activity Spectra for Substances*) adalah software berbasis PC yang digunakan untuk memprediksi aktivitas biologis dari suatu senyawa. Analisis dengan PASS sudah banyak dilakukan yaitu 205.000 senyawa dan hasilnya mempunyai lebih dari 3.750 aktivitas biologis (Pramely & Raj, 2012).

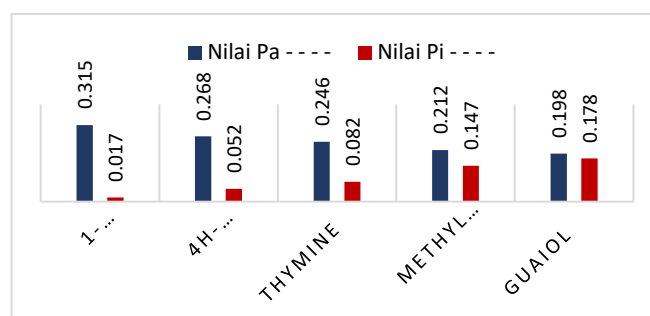
Tabel C.1 Hasil Analisis Mekanisme Antivirus SARS-CoV-2 Menggunakan Software PASS Online

No.	Nama Senyawa	Nilai Pa	Nilai Pi	Mekanisme antivirus
1.	2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydro-.alpha.,.alpha.,4a,8-tetramethyl-, (2R-cis)-	-	-	-
2.	4,5-Diamino-2-hydroxypyrimidine	-	-	-
3.	4-O-	-	-	-

	HEXOPYRANOSYLHEXOPYRANOSE			
4.	.beta.-D-Glucopyranose, 4-O-.beta.-D-galactopyranosyl-	-	-	-
5.	Silicone Oil	-	-	-
6.	Guaiol	0,198	0,178	3C-like protease (Human coronavirus) inhibitor
7.	Methyl-.beta.-D-arabinopyranoside	0,212	0,147	3C-like protease (Human coronavirus) inhibitor
8.	Thymine	0,246	0,082	3C-like protease (Human coronavirus) inhibitor
9.	4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-	0,268	0,052	3C-like protease (Human coronavirus) inhibitor
10.	1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol	0,315	0,017	3C-like protease (Human coronavirus) inhibitor

Tabel 4.6 menunjukkan hasil analisis mekanisme antivirus SARS-CoV-2 dari senyawa antiviral hasil analisis software PubChem sebelumnya. Dari 10 senyawa antiviral, diperoleh 5 senyawa yang memiliki mekanisme antivirus SARS-CoV-2, sedangkan 5 senyawa lainnya tidak ditemukan mekanisme antivirus SARS-CoV-2. Mekanisme antivirus SARS-CoV-2 yang diperoleh dari hasil analisis software PASS Online yaitu sebagai 3C-like protease (Human coronavirus) Inhibitor. Hasil analisis pada tabel 4.6 kemudian diubah kedalam grafik sehingga menghasilkan susunan grafik sebagai berikut.

Dari grafik diatas dapat dilihat perbandingan nilai Pa senyawa antivirus sebagai 3C-like protease (Human coronavirus) Inhibitor. Nilai Pa tertinggi sebesar 0,315 pada senyawa 1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol, sedangkan nilai Pa terendah sebesar 0,198 pada senyawa Guaiol.



Gambar 13. Grafik Mekanisme Antivirus Hasil Analisis Software PASS Online

Pembahasan

Berdasarkan prosedur atau langkah-langkah penelitian yang telah dilakukan, daun dan biji Jamblang memiliki kandungan minyak esensial dengan perbedaan volume. Pada daun jamblang diperoleh minyak esensial sebanyak 4,82mL/4kg, sedangkan minyak esensial biji jamblang yang didapatkan sebanyak 3,27mL/3kg. Perbedaan volume minyak esensial yang diperoleh dikarenakan perbedaan jumlah sampel yang digunakan. Minyak esensial yang diperoleh dari kedua sampel memiliki ciri berwarna kuning pucat, bening, dan memiliki aroma khas dari tanaman jamblang, Menurut Hendartomo (2005), hasil minyak yang kurang maksimal disebabkan oleh beberapa kemungkinan dan salah satunya adalah bahan baku yang kurang baik. Hal ini disebabkan oleh terlalu lamanya proses pengeringan dan penyimpanan yang menyebabkan daun mejadi kurang baik untuk di proses dan diambil minyaknya. Sehingga di khawatirkan banyak berkurangnya minyak jamblang dalam daun dan biji jamblang tersebut.

Tabel C.1 menunjukkan hasil analisis GC-MS senyawa fitokimia yang teridentifikasi pada ekstraksi minyak esensial daun jamblang sebanyak 45 senyawa fbioaktif yang di mulai dari 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl- dengan waktu retensi terendah 4.32 sampai

yang terakhir yaitu 2-Naphthalenemethanol, decahydro-.alpha.,.alpha.,4a-trimethyl-8-methylene-, [2R-(2.alpha.,4a.alpha.,8a.beta.)]- dengan waktu retensi tertinggi 10.06. Table C.2 menunjukkan bahwa jumlah senyawa fitokimia yang terdapat pada minyak esensial biji jambang sebanyak 69 senyawa bioaktif yang dimulai dari Ethanamine, N-ethyl-N-nitroso- dengan waktu retensi terendah 3.47 sampai yang terakhir [3,3-DIMETHYL-1-(2-PHENYLETHYL)-4-PENTENYL]BENZENE dengan waktu retensi tertinggi 13.98. Adanya perbedaan kandungan senyawa fitokimia dari suatu bagian tumbuhan dapat dipengaruhi oleh perbedaan pada proses pembentukan senyawa pada organ tumbuhan (Lestari, 2018). Perbedaan fungsi organ tanaman dapat menyebabkan perbedaan jalur biosintesis kandungan fitokimia pada bagian-bagian tanaman (Husnawati *et al.*, 2020). GCMS merupakan alat yang dapat menganalisis dan mengidentifikasi senyawa kimia yang terdapat dalam obat tradisional/ tanaman obat. GCMS berperan penting dalam menganalisis senyawa non polar, minyak atsiri, asam lemak, lipid dan alkaloid. Identifikasi senyawa kimia dikonfirmasi berdasarkan puncak area dan waktu retensi. Senyawa diukur menggunakan normalisasi area puncak (Surahmida *et al.* 2019).

Hasil analisis Pubchem menunjukkan bahwa pada daun jambang terdapat 4 senyawa yang memiliki bioaktivitas antiviral yaitu Methyl-.beta.-D-arabinopyranoside ; Guaiol ; 2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydro-.alpha.,.alpha.,4a,8-tetramethyl-, (2R-cis)- ; dan 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-. Sedangkan pada biji jambang terdapat 7 senyawa yang memiliki bioaktivitas sebagai antiviral diantaranya 4,5-Diamino-2-hydroxypyrimidine ; Thymine ; 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl- ; 1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol ; 4-O-HEXOPYRANOSYLHEXOPYRANOSE ; .beta.-D-Glucopyranose, 4-O-.beta.-D-galactopyranosyl- ; dan Silicone Oil. Sehingga diperoleh sebanyak 10 senyawa fitokimia yang memiliki bioaktivitas sebagai antiviral. Dari hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa senyawa daun dan biji jambang memiliki potensi sebagai antivirus. Hal ini menunjukkan bahwa PubChem merupakan sebuah database yang menyimpan kumpulan data molekul-molekul yang terdiri dari tiga basis data yang saling terkait, Substansi, Komponen, dan BioAssay (Kim *et al.*, 2016).

Hasil uji aktivitas antivirus didukung dengan hasil analisis antiviral activity menggunakan program PASS prediction online. Berdasarkan hasil analisis mekanisme antivirus SARS-CoV-2 yang diperoleh pada Tabel C.3, terdapat 5 senyawa yang memiliki mekanisme antivirus SARS-CoV-2 sedangkan 5 senyawa lainnya tidak memiliki mekanisme antivirus SARS-CoV-2, tetapi memiliki aktivitas untuk antivirus lain (seperti antiviral HIV, antiviral Herpes, Antiviral Picornavirus dll). Mekanisme yang diperoleh dari analisis PASS Online yaitu sebagai *3C-Lpro inhibitor (3C-Like Protease (Human Coronavirus) inhibitor)*. Berdasarkan hasil uji seperti pada Tabel C.3 menunjukkan bahwa nilai Pa (*Probable activity*) tertinggi adalah senyawa 1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol dengan nilai Pa sebesar 0,315 dan nilai Pi sebesar 0,017 sebagai *3Clpro inhibitor (3C-Like (Human coronavirus) Protease inhibitor)*. Sehingga pada software ini, mekanisme *3Clpro inhibitor* pada senyawa 1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol memiliki nilai Pa < 0,5, sehingga kemungkinan untuk menemukan aktivitas senyawa secara eksperimental sangat kecil. Menurut Pramely & Raj (2012), Hasil prediksi PASS online diinterpretasikan dengan cara berikut: (i) jika Pa>0,7, peluang untuk menemukan aktivitas secara eksperimental tinggi,(ii) jika 0,5<Pa<0,7, peluang untuk menemukan aktivitas secara eksperimental lebih kecil, tetapi senyawa tersebut mungkin tidak begitu mirip dengan obat yang sudah ada, (iii) jika Pa<0,5, peluang untuk menemukan aktivitas secara eksperimental sangat kecil. Perbandingan nilai Pa senyawa antivirus SARS-CoV-2 juga dapat dilihat pada grafik Gambar C.12. Nilai Pa juga menunjukkan potensi suatu senyawa terhadap berbagai aktivitas biologis berdasarkan struktur hubungan aktivitas (*Structural Activity Relationship*) antara senyawa-senyawa alami dengan obat sintetik (Pramely & Raj, 2012).

Penelitian mengenai senyawa anti-Covid-19 melalui penghambatan *3Clpro* dilakukan oleh Bare *et al.*, (2022) menggunakan senyawa yang berasal dari kulit kopi melalui studi *in silico*. Berdasarkan penelitian tersebut, terdapat tiga senyawa yang diprediksi menghambat *3Clpro* yaitu senyawa Hexosa, Malic acid, D-manitol. Masing-masing dari ketiga senyawa ini berinteraksi

dengan 3C_{lpro} dengan mengikat enam residu asam amino, sehingga total pengikatan residu asam amino sebanyak delapan belas dengan residu asam amino yang berbeda. Pengikatan residu asam amino berkaitan dengan kinerja protein p53. Ketiga senyawa kulit kopi yang diinteraksikan dengan protein 3C_{lpro} melalui penghambatan delapan belas residu asam amino diprediksi memiliki peran dan akan mempengaruhi kinerja protein p53 sehingga proses transformasi dari virus covid tidak terjadi dan diprediksi potensi senyawa kulit kopi menjadi terapi Covid-19.

D. KESIMPULAN DAN SARAN

Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan dan data yang telah diperoleh maka dapat disimpulkan bahwa:

1. Jumlah total keseluruhan senyawa daun dan biji jamblang yaitu 114 senyawa fitokimia. Pada daun jambang, diketahui bahwa terdapat 45 senyawa, sedangkan pada biji jamblang terdapat 69 senyawa. Sedangkan pada keduanya yaitu daun dan biji jamblang, terdapat 3 jenis senyawa yang serupa.
2. Dari total senyawa bioaktif daun dan biji jamblang, diketahui terdapat 10 senyawa yang memiliki bioaktivitas sebagai antivirus yaitu Methyl-.beta.-D-arabinopyranoside ; Guaiol ; 2-Naphthalenemethanol, 1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydro-.alpha.,.alpha.,4a,8-tetramethyl-, (2R-cis)- ; 4,5-Diamino-2-hydroxypyrimidine ; Thymine ; 4H-Pyran-4-one, 2,3-dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-;1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol ; 4-O-HEXOPYRANOSYLHEXOPYRANOSE ; dan .beta.-D-Glucopyranose, 4-O-.beta.-D-galactopyranosyl- ; dan Silicone Oil.
3. Mekanisme antivirus SARS-CoV-2 yang diperoleh dari senyawa antivirus pada penelitian ini yaitu sebagai 3C-L_{pro} inhibitor (3C-Like (Human coronavirus) Protease inhibitor) dengan nilai Pa tertinggi sebesar 0,315 pada senyawa 1-Nitro-2-acetamido-1,2-dideoxy-d-mannitol dan nilai Pa terendah sebesar 0,198 pada senyawa Guaiol.

Saran

Berdasarkan hasil penelitian yang telah diperoleh beserta data dan fakta yang terlampir mengenai potensi minyak esensial daun dan biji Jamblang (*Syzygium cumini*) sebagai antivirus SARS-CoV-2 beserta mekanisme antivirusnya, penulis menyarankan pada penelitian berikutnya agar kedepannya lebih variatif lagi dalam menggunakan organ Jamblang dan juga menggunakan varietas yang lain. Sehingga didapatkan perbandingan antar varietas, yang tujuannya untuk melihat efektivitas serta efisiensi dalam kegunaannya baik sebagai antivirus SARS-CoV-2 ataupun sebagai senyawa bioaktivitas lainnya.

E. DAFTAR PUSTAKA

- Bare Y., Timba F. N. S., Nurak M. M. D., Mogi, M. C. 2022. Eksplorasi Senyawa Kulit Kopi sebagai Anti Covid-19 Melalui Penghambatan 3C-Like Protease. *Jurnal Pendidikan Mipa*. 12(2):127-133. <https://doi.org/10.37630/jpm.v12i2.563>
- Darmapatni K. A. G., Basori A., Suaniti, N. M. 2016. Pengembangan Metode GC-MS Untuk Penetapan Kadar Acetaminophen Pada Spesimen Rambut Manusia. *Jurnal Biosains Pascasarjana*. 18(3):255-265.
- Diningrat S. D., Sari A. N., Sari N. H. 2021. In Silico Study of The Toxicity and Antiviral Activity Prediction of Jamblang (*Syzygium cumini*) Leaves Essential Oil As ACE2 Inhibitor. *Pharmacology Online*. 3:1334–1351. <https://www.rcsb.org/structure/1R4L>
- Haroon R., Jelani S., Arshad F. K. 2015. Comparative Analysis of Antioxydant Profiles of Bark, Leaves and Seeds of *Syzygium cumini* (Indian Blackberry). *International Journal of Research-Granthaalayah*. 3(5):13-26.
- Husnawati, Purwanto U. M. S., Rispriandari, A. A. 2020. Perbedaan Bagian Tanaman Krokot (*Portulaca grandiflora* Hook.) Terhadap Kandungan Total Fenolik dan Flavonoid serta Aktivitas Antioksidan. *Current Biochemistry*. 7(1):10-20.

- Julianto T. S. 2016. *Minyak Atsiri Bunga Indonesia* (1st ed.). Depublish Publisher.
- Kim S., Thiessen P. A., Cheng T., Yu B., Shoemaker B. A., Wang J., Bolton E. E., Wang Y., Bryant S. H. 2016. Literature information in PubChem: Associations between PubChem records and scientific articles. *Journal of Cheminformatics*. 8(1):1-15. <https://doi.org/10.1186/s13321-016-0142-6>
- Lestari N. A. 2018. Metabolite profiling bagian akar, batang, daun, dan bunga dari ekstrak Etanol 96% *Chrysanthemum cinerariifolium* dengan metode UPLC-QTOF-MS/MS (Doctoral dissertation, Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim).
- Ma L., Yao L. 2020. Antiviral effects of plant-derived essential oils and their components: An updated review. In *Molecules*. 25(11):1-13. MDPI AG. <https://doi.org/10.3390/molecules25112627>
- Marliani L., Kusriani H., Nur Indah Sari. 2014. Aktivitas Antioksidan Daun Dan Buah Jamblang (*Syzygium cumini* L.) Skeel. *Prosiding SNaPP2014 Sains, Teknologi, Dan Kesehatan*. 201-206.
- Marliani, L., Sari, N. I., & Yuniarti, S. (2014). Aktivitas Antioksidan Dan Kandungan Senyawa Fenolat Biji Jamblang (*Cyzygium cumini* (L.) Skeels. *Jurnal Farmasi Galenika*. 1(2):43-47.
- Ma'sum Z., Proborini D. W. 2016. Optimasi Proses Destilasi Uap Essential Oil. *Jurnal Reka Buana*. 1(2), 105–109.
- Nursamsiar, Toding, A. T., Awaluddin, A. 2016. In-Silico Study Chalcone And Pyrimidine Analog Derivatives As Anti-Inflammatory: Prediction Of Absorption, Distribution, And Toxicity. *Pharmacy*. 13(01):92-100. <http://www.chemaxon.com/>
- Pramely R., Raj T. L. S. 2012. Prediction of biological activity spectra of a few phytoconstituents of *Azadirachta indica* A. Juss. *J Biochem Tech*. 3(4):375-379.
- Sanders J. M., Monogue M. L., Jodlowski T. Z., Cutrell, J. B. 2020. Pharmacologic Treatments for Coronavirus Disease 2019 (COVID-19) A Review. *JAMA*. 323(18):1824-1836. <https://doi.org/10.1001/jama.2020.6019>
- Septiana E. 2020. Prospek Senyawa Bahan Alam Sebagai Antivirus Dalam Menghambat SARS-CoV-2. *BioTrends*. 11(1):30-38.
- Setiawan F. F., Istyastono E. P. 2015. Uji In Silico Senyawa 2.6-Dihidroksiantraquinon Sebagai Ligan Pada Reseptor Estrogen Alfa. *Jurnal Farmasi Sains Dan Komunitas*. 12(2):77-80.
- Surahmida, Umarudin. 2019. Identifikasi dan Analisa Senyawa Kimia Ekstrak Daun Miana (*Coleus blumei*). *IPTEK Jurnal of Proceedings Series*. (2):2354-6026.
- Tazeen A., Deeba F., Zoya S., Faizan Md. I., Sarwat M., Parvez M. K., Parveen S. 2021. Natural Compounds as Potential Therapeutic Agents against COVID-19. *Covid-19 Pandemic*. 168-196.
- Thuy B. T. P., My T. T. A., Hai N. T. T., Hieu L. T., Hoa T. T., Thi Phuong Loan H., Triet N. T., Anh T. T. van, Quy P. T., Tat P. van, Hue N. van, Quang D. T., Trung N. T., Tung V. T., Huynh L. K., Nhung N. T. A. 2020. Investigation into SARS-CoV-2 Resistance of Compounds in Garlic Essential Oil. *ACS Omega*. 5(14):8312-8320. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00772>