

ABSTRACT

STUDY OF ACTIVE COMPOUNDS IN THE BARK EXTRACT OF GOLDEN SHOWER TREE (*Senna multijuga*) AS AN ANTIFUNGAL AGAINST *Botrytis cinerea* USING AN *IN SILICO* APPROACH

By

AGIL TRIHASTOMO

The golden shower tree (*Senna multijuga*) remains underutilized despite its potential as a source of secondary metabolites with antifungal properties that may help prevent plant damage caused by pathogenic fungi. One of the pathogenic fungi responsible for significant economic losses during the postharvest period is *Botrytis cinerea*. Therefore, the development of natural biofungicides is needed to prevent the spread of *Botrytis cinerea* while ensuring environmental sustainability and food safety. This study aimed to identify active compounds in the bark of *Senna multijuga* with potential antifungal activity against *Botrytis cinerea* through an *In silico* approach. The research employed an experimental method with descriptive analysis, including chromatographic column fractionation of the most effective extract, LC-MS analysis of the best fraction, and *In silico* evaluation of the obtained data. The results were presented in the form of figures and tables. LC-MS analysis revealed the presence of various compounds with potential antifungal activity. Molecular *docking* analysis showed that Conicasterol B exhibited the best binding affinity value of -10.7 kcal/mol against the 4GF8 target protein through hydrophobic interactions with residues LEU A:480, LEU A:484, TYR A:497, PRO A:506, LEU B:480, LEU B:484, TYR B:304, and TYR B:497. Furthermore, Conicasterol B demonstrated inhibitory potential against the ATP-dependent RNA helicase target protein (5U6M) with a binding affinity value of -9.1 kcal/mol through a hydrogen bond interaction with TYR A:177 and hydrophobic interactions involving residues PHE A:43, PHE A:70, PHE A:246, TYR A:180, LEU A:245, MET A:274, and TRP A:364. Therefore, the findings indicate that Conicasterol B, an active compound identified from the bark extract of *Senna multijuga*, has potential as an antifungal agent against *Botrytis cinerea*.

Kata kunci: Antifungal, *Senna multijuga*, *In silico*, molecular docking, *Botrytis cinerea*

ABSTRAK

KAJIAN KOMPONEN AKTIF EKSTRAK KULIT HUJAN EMAS (*Senna multijuga*) SEBAGAI ANTIJAMUR *Botrytis cinerea* MELALUI PENDEKATAN *IN SILICO*

Oleh

AGIL TRIHASTOMO

Tanaman hujan emas (*Senna multijuga*) masih kurang di manfaatkan padahal terdapat metabolit sekunder yang berpotensi sebagai antijamur untuk mencegah kerusakan tanaman akibat jamur patogen. Salah satu jamur patogen yang menyebabkan kerugian ekonomi selama pascapanen yaitu jamur *Botrytis cinerea*. Sehingga dibutuhkan biofungisida alami yang berperan untuk mencegah penyebaran *Botrytis cinerea* sekaligus aman untuk lingkungan dan keamanan pangan. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan senyawa aktif pada kulit hujan emas (*Senna multijuga*) yang berpotensi sebagai antijamur *Botrytis cinerea* secara *In silico*. Penelitian ini menggunakan metode eksperimen dengan analisis secara deskriptif meliputi hasil ekstraksi terbaik diuji dengan kolom kromatografi, fraksi terbaik di uji dengan LC-MS, dan data yang diperoleh dilakukan pengujian *In silico*. Hasil yang didapatkan akan ditampilkan dalam bentuk gambar dan tabel. Hasil LC-MS menunjukkan keberadaan berbagai senyawa yang berpotensi sebagai antijamur, sedangkan hasil *docking* memperlihatkan bahwa senyawa Conicasterol B menunjukkan nilai *binding affinity* terbaik sebesar -10,7 kcal/mol pada gen 4GF8 melalui ikatan hidrofobik dengan residu LEU A 480, LEU A 484, TYR A 497, PRO A 506, LEU B 480, LEU B 484, TYR B 304, TYR B 497, serta menghambat protein target ATP dependent helicase RNA gen 5U6M dengan nilai *binding affinity* -9.1 kcal/mol melalui ikatan hydrogen TYR A 177 dan ikatan hidrofobik PHE A 43, PHE A 70, PHE A 246, TYR A 180, LEU A 245, MET A 274, TRP A 364. Dengan demikian, hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa aktif Conicasterol B dari ekstrak kulit *Senna multijuga* berpotensi sebagai antijamur *Botrytis cinerea*.

Kata kunci: Antijamur, *Senna multijuga*, *In silico*, *molecular docking*, *Botrytis cinerea*