

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Jamur *Sclerotinia sclerotiorum* (*S. sclerotiorum*) adalah salah satu jenis jamur patogen yang bersifat merusak dan kosmopolitan. Sifat patogennya menyebabkan kebusukan pada daun dan batang tanaman yang terinfeksi. Infeksi jamur *S. sclerotiorum* ini mempengaruhi sektor ekonomi pertanian (Wang, *et al.*, 2016). Contohnya penurunan produksi pada tanaman kanola hingga 80% (*Brassica napus*) (Wang, *et al.*, 2009) dan keterbatasan ketersediaan kedelai (McCaghey, *et al.*, 2019).



Gambar 1.1. Sclerotia *S. sclerotiorum* di dalam batang kedelai (Peltier, *et al.*, 2012)

Jamur *S. sclerotiorum* biasanya dikendalikan dengan menggunakan antijamur atau fungisida kimia (Tao, *et al.*, 2021). Namun, antijamur yang digunakan belakangan masih memiliki kekurangan. Pemakaian antijamur yang terus-menerus atau dalam jangka waktu yang panjang dan berlebihan menimbulkan resistensi (Matsuzaki, *et al.*, 2020). Oleh sebab itu, sintesis turunan senyawa baru dibutuhkan untuk mengatasi resistensi antijamur pada antijamur *S. sclerotiorum*.

Sebuah metode yang dapat digunakan untuk mengatasi masalah tersebut salah satunya adalah *Quantitative-Structure Activity Relationship* (QSAR). QSAR adalah hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas, dalam Bahasa Indonesia disingkat menjadi HKSA (Santoso, *et al.*, 2022). Analisis dengan QSAR secara umum digunakan dalam penemuan obat (Chen, *et al.*, 2020). QSAR dapat

digunakan untuk mengetahui hubungan antara struktur senyawa dan aktivitas antijamur yang dimiliki suatu senyawa. Pengetahuan kuantitatif antara struktur dan aktivitas menguntungkan dalam sisi waktu dan biaya karena tidak dilakukan langsung di laboratorium (Ma, *et al.*, 2020).

Selanjutnya, untuk memprediksi interaksi antara senyawa dan protein dibutuhkan studi *molecular docking*. Studi *molecular docking* adalah suatu proses komputasi mencari ligan yang cocok secara geometris ke situs pengikatan protein. *Molecular docking* digunakan untuk meniru peristiwa interaksi suatu molekul ligan dengan protein yang menjadi targetnya melalui simulasi model menggunakan komputer (Prasetyawati, *et al.*, 2021). Terdapat beberapa target protein pada studi *molecular docking* sebagai antijamur *S. sclerotiorum* yang telah dilakukan. Diantaranya protein suksinat dehidrogenase (Gao *et al.*, 2020), demetilase (Rastija *et al.*, 2021), dan *Sclerotinia sclerotiorum* agglutinin (Onaran *et al.*, 2021). Pada penelitian ini protein yang digunakan adalah *Sclerotinia sclerotiorum* agglutinin.

Penelitian sebelumnya telah dilakukan kajian mengenai desain, sintesis dan uji aktivitas antijamur *S. sclerotiorum* dari turunan fenilpirimidin oleh Deng *et al.*, (2020). Hasil kajian menunjukkan potensi senyawa turunan fenilpirimidin sebagai antijamur *S. sclerotiorum*. Hasil data yang diperoleh oleh Deng *et al.*, (2020) digunakan sebagai data sekunder QSAR dan *molecular docking*.

Pada penelitian ini, senyawa turunan fenilpirimidin dipresentasikan dalam bentuk graf. Graf digunakan sebagai deskriptor QSAR. Graf adalah struktur diskrit yang terdiri dari himpunan simpul dan himpunan jalur (Andhany, 2023). Metode statistik yang digunakan adalah *Multiple Linear Regression* (MLR). Sehingga, penelitian ini ditujukan mencari persamaan QSAR berbasis deskriptor graf dan *molecular docking* dari turunan fenilpirimidin sebagai antijamur *S. sclerotiorum*.

1.2 Rumusan Masalah

Penelitian ini dilakukan untuk menjawab pertanyaan yang dirumuskan sebagai berikut:

1. Bagaimana model persamaan QSAR untuk memprediksi aktivitas senyawa turunan fenilpirimidin dengan deskriptor graf?

2. Bagaimana desain struktur senyawa turunan fenilpirimidin berdasarkan persamaan QSAR?
3. Bagaimana interaksi senyawa hasil desain dengan reseptor berdasarkan studi *molecular docking*?

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian berdasarkan rumusan masalah adalah sebagai berikut:

1. Membuat model persamaan QSAR untuk memprediksi aktivitas senyawa turunan fenilpirimidin dengan deskriptor graf.
2. Mendesain struktur senyawa turunan fenilpirimidin baru dengan menggunakan persamaan QSAR yang telah didapatkan
3. Mengkaji interaksi antara senyawa hasil desain dan reseptor berdasarkan studi *molecular docking*.

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dilakukannya penelitian ini diantaranya:

1. Berkontribusi pada penelitian mengenai QSAR untuk pemodelan QSAR menggunakan deskriptor graf dan *Molecular docking*
2. Memberikan model persamaan QSAR baru untuk memprediksi senyawa turunan fenilpirimidin sebagai antijamur.
3. Memperlihatkan interaksi antara senyawa hasil desain dan reseptor berdasarkan studi *molecular docking*.