

Binding Affinity of Potato, Cassava, and Purple Yam Phytochemicals to *Fusarium* Proteins: Insights from Molecular Docking

Gilang Vaza Benatar^{1*}, Abdul Hakim¹, Siti Nur Anisah¹, Roni Maulana Sidiq¹, Rafif Naufal Assadel Tarigan¹

¹Program Studi Agroteknologi, Fakultas Pertanian, Universitas Siliwangi, Kota Tasikmalaya, Indonesia;

Article History

Received : September 01th, 2025

Revised : September 11th, 2025

Accepted : September 26th, 2025

*Corresponding Author: **Gilang Vaza Benatar**, Program Studi Agroteknologi, Fakultas Pertanian, Universitas Siliwangi, Kota Tasikmalaya, Indonesia; Email: benatargv@unsil.ac.id

Abstract: *Fusarium* species are destructive plant pathogens responsible for severe crop losses thereby posing a critical threat to global food security. Sustainable strategies to control *Fusarium*-induced diseases are urgently needed due to limitations of synthetic fungicides. This study investigated the interaction of phytochemicals from potato (*Solanum tuberosum*), cassava (*Manihot esculenta*), and purple yam (*Dioscorea alata*) with three *Fusarium* proteins: LaeA, Pep2, and VeA. Protein structures were modeled and validated using stereochemical analyses, followed by molecular docking with representative metabolites, including pyrogallol, cyclogallipharol, scopoletin, linamarin, cyanidin-3-glucoside, and peonidin-3-glucoside. Docking results showed that potato metabolites exhibited moderate binding activity, cassava metabolites displayed broader inhibitory potential, and purple yam anthocyanins demonstrated the strongest affinities (−6.7 to −7.4 kcal/mol) through multiple hydrogen bonds, hydrophobic contacts, and electrostatic interactions. Among the targets, Pep2 showed consistently stable interactions, while LaeA and VeA exhibited greater flexibility but remained responsive to anthocyanins. These findings highlight the potential of edible crop-derived phytochemicals, particularly anthocyanins and scopoletin, as eco-friendly antifungal agents. The structural basis provided here supports future experimental validation and the development of sustainable crop protection strategies.

Keywords: Anthocyanins, bioinformatics, phytopathogens, phytochemistry, secondary metabolites.

Pendahuluan

Ketahanan pangan merupakan pilar fundamental dari keberlanjutan kehidupan global karena berkaitan erat dengan pertumbuhan penduduk, keberlanjutan lingkungan, pertumbuhan ekonomi sekaligus kebutuhan dan kesejahteraan nutrisi masyarakat (Hussain et al., 2025). Namun, penyakit tanaman masih menjadi salah satu ancaman terbesar terhadap produktivitas pangan dunia, yang dapat melemahkan upaya menjaga stabilitas pasokan pangan (Savary et al., 2019). Di antara berbagai kelompok patogen, jamur menjadi ancaman paling merusak karena memiliki jangkauan inang yang luas dan kemampuan adaptasi yang tinggi.

Dengan faktor-faktor seperti variasi genetik tanaman, tekanan seleksi alami majipun antropogenik serta dinamika populasi, patogen jamur terus berevolusi dengan mengembangkan sifat-sifat baru, seperti peningkatan virulensi, kemampuan beradaptasi terhadap kondisi lingkungan, hingga menjadi resisten lalu menjadi sulit dikendalikan (Kusch et al., 2023; Madhushan et al., 2025).

Spesies *Fusarium* merupakan salah satu patogen jamur tanaman yang paling merusak, menyebabkan layu pembuluh, busuk akar, dan pembusukan buah pada berbagai komoditas tanaman penting. Misalnya, *F. oxysporum* dapat menyerang lebih dari 150 tanaman, terutama menyebabkan layu pembuluh pada tomat dan

melon, yang sangat penting bagi rantai pasok pangan global (Ekwomadu & Mwanza, 2023; Pfordt et al., 2020; J. Wang et al., 2021). Lebih lanjut, baik *F. oxysporum* f. sp. *lycopersici* maupun *F. solani* secara khusus disorot sebagai agen penyebab kerugian ekonomi yang besar pada tanaman solanaceae seperti tomat dan kentang (Bisen et al., 2023; Ribeiro et al., 2022; Srinivas et al., 2019). Strategi pengendalian tradisional, termasuk fungisida sintetik, telah menimbulkan kekhawatiran akibat resistensi patogen, risiko lingkungan, dan akumulasi residu dalam rantai makanan (Suarez et al., 2024; Uwineza et al., 2024). Akibatnya, terdapat kebutuhan mendesak untuk mengidentifikasi alternatif antijamur yang lebih aman dan berkelanjutan, terutama untuk mengendalikan penyakit yang disebabkan oleh patogen dari genus *Fusarium* (Pan et al., 2025; Resiani et al., 2025).

Fitokimia yang berasal dari tanaman pangan seperti kentang (*Solanum tuberosum*), singkong (*Manihot esculenta*), dan ubi ungu (*Dioscorea alata*) telah menarik minat sebagai kandidat antijamur yang ramah lingkungan. Metabolit ini, termasuk fenolik, kumarin, glikosida sianogenik, dan antosianin, dilaporkan memberikan efek antimikroba dengan mengganggu proses seluler, mengganggu enzim jamur, atau memodulasi ekspresi gen (Ikyenge et al., 2024; Kurnianingsih et al., 2021; Mohidin et al., 2023; Samoh et al., 2025). Meskipun memiliki potensi ini, penelitian terkait dasar molekuler kombinasi interaksinya dengan protein pengatur patogenisitas *Fusarium* belum dilakukan.

Kemajuan terbaru dalam komputasi biologi, khususnya pemodelan homologi (*homology modelling*) dan penambatan molekuler (*molecular docking*), menyediakan pendekatan yang kuat serta alat yang ampuh untuk memprediksi interaksi ligan-protein dan untuk mengeksplorasi potensi penghambatan senyawa alami. Pada *Fusarium*, protein kunci seperti LaeA, Pep2, dan VeA berperan penting dalam virulensi dan adaptasi jamur (Fraser-Smith et al., 2014; Merhej et al., 2012; G. Wang et al., 2019). Menargetkan protein-protein ini dengan fitokimia alami dapat memberikan strategi baru untuk melemahkan patogenisitas dan mengendalikan penyakit yang ditimbulkan. Penelitian ini bertujuan untuk menyelidiki

potensi pengikatan fitokimia senyawa yang terkandung di dalam kentang, singkong, dan ubi ungu terhadap protein LaeA, Pep2, dan VeA dari *Fusarium* spp. Melalui pemodelan protein, validasi stereokimia, dan penambatan molekul, studi ini berupaya mengkaraktirasi afinitas pengikatan dan profil interaksi metabolit representatif. Penelitian ini memberikan wawasan mekanistik terhadap senyawa antijamur yang berasal dari tumbuhan dan membangun fondasi struktural untuk kemungkinan penerapannya dalam strategi perlindungan tanaman berkelanjutan.

Bahan dan Metode

Waktu dan tempat penelitian

Penelitian ini dilaksanakan pada bulan Juli–Agustus 2025 di Laboratorium Bioteknologi, Program Studi Agroteknologi, Fakultas Pertanian, Universitas Siliwangi. Seluruh analisis *in silico* dilakukan menggunakan perangkat komputer dengan spesifikasi standar penelitian bioinformatika (Ryzen 7-7435, grafis Nvidia Geforce RTX 4060) dan akses ke basis data daring.

Desain penelitian

Penelitian ini menggunakan desain *in silico* dengan pendekatan *molecular docking* untuk mengevaluasi interaksi senyawa fitokimia (populasi senyawa: metabolit dari kentang, singkong, dan ubi ungu). Sampel penelitian berupa enam senyawa representatif, yaitu pirolgalol, siklogallipharol, skopoletin, linamarin, sianidin-3-glukosida, dan peonidin-3-glukosida yang diperoleh dari basis data PubChem. Teknik pemilihan sampel senyawa didasarkan pada laporan penelitian sebelumnya yang relevan (Ikyenge et al., 2024; Kurnianingsih et al., 2021; Mohidin et al., 2023; Samoh et al., 2025). Variabel bebas berupa jenis fitokimia, sedangkan variabel terikat berupa nilai afinitas pengikatan (*binding affinity*) terhadap protein target. Data penelitian dikumpulkan melalui simulasi pemodelan protein dan docking molekul. Alat dan bahan utama yang digunakan meliputi perangkat lunak SWISS-MODEL untuk pemodelan protein, PyRx untuk simulasi docking, serta Biovia Discovery Studio Visualizer dan PyMOL untuk analisis interaksi.

Prosedur penelitian

Fitokimia Urutan asam amino dari tiga protein target LaeA (LAEA_FUSO4, *Fusarium oxysporum* f. sp. *lycopersici* strain 4287), Pep2 (PEP2_FUSSL, *Fusarium solani*), dan VeA (VEA_FUSO4, *Fusarium oxysporum* f. sp. *lycopersici* strain 4287) diperoleh dari basis data UniProt. Pemodelan homologi dilakukan dengan SWISS-MODEL, dan kualitas struktur dievaluasi melalui visualisasi struktural, estimasi kualitas

lokal tingkat residu, serta analisis plot Ramachandran. Struktur 3D senyawa fitokimia diunduh dari PubChem dalam format SDF, kemudian dimodifikasi melalui minimisasi energi menggunakan parameter medan gaya standar. Docking molekul dilakukan dengan PyRx melalui metode *blind docking*, dengan pengaturan kotak grid yang mencakup seluruh situs aktif protein. Afinitas pengikatan dinyatakan dalam kkal/mol.

Tabel 1. Protein *Fusarium* yang digunakan dalam studi pemodelan dan penambatan molekul

Nama protein	Gen	Fungsi	Organisme	UniProt ID
Pea pathogenicity protein 2	PEP2	Berkontribusi pada kemampuan jamur untuk menyebabkan penyakit pada tanaman kacang polong	<i>Fusarium solani</i>	Q9C1K0
Developmental and secondary metabolism regulator veA	veA	Mengontrol gugus gen biosintesis beauvericin, mikotoksin depsipeptida yang berfungsi sebagai penentu virulensi	<i>Fusarium oxysporum</i> f. sp. <i>lycopersici</i>	A0A0D2Y4S0
Secondary metabolism regulator laeA	laeA	Mengontrol gugus gen biosintesis beauvericin, mikotoksin depsipeptida yang berfungsi sebagai penentu virulensi	<i>Fusarium oxysporum</i> f. sp. <i>lycopersici</i>	A0A0J9UBD6

Analisis Data

Hasil docking dianalisis secara deskriptif dengan membandingkan nilai energi ikatan (*binding affinity*) antar senyawa dan protein target (Tabel 1). Interaksi ligan–protein dianalisis menggunakan Biovia Discovery Studio Visualizer dan PyMOL untuk mengidentifikasi ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik, elektrostatik, maupun bentrokan atom. Data interaksi tersebut kemudian dikaitkan dengan potensi penghambatan protein target *Fusarium*.

Hasil dan Pembahasan

Pemodelan Protein

Penilaian struktural tiga protein *Fusarium*, LaeA (LAEA_FUSO4), Pep2 (PEP2_FUSSL), dan VeA (VEA_FUSO4), memberikan wawasan penting tentang kualitas pelipatan, relevansi fungsional, dan kesesuaiannya untuk analisis penambatan molekul selanjutnya. Setiap model dievaluasi melalui visualisasi permukaan,

estimasi kualitas tingkat residu, dan analisis plot Ramachandran, yang bersama-sama memberikan penilaian stereokimia keandalan protein dan potensi fungsional.

Model LaeA, regulator metabolisme sekunder global pada *Fusarium oxysporum* f. sp. *lycopersici*, menunjukkan stabilitas sedang. Estimasi kualitas lokal menunjukkan fluktuasi yang signifikan di beberapa posisi residu (lihat Gambar 1-a), dengan beberapa wilayah menunjukkan tingkat kepercayaan yang berkurang. Hal ini menunjukkan adanya domain yang fleksibel secara intrinsik, yang sering terlibat dalam memediasi interaksi dengan kompleks terkait kromatin. Terlepas dari variasi ini, plot Ramachandran menunjukkan bahwa sebagian besar residu terletak dalam ruang konformasi yang diizinkan, yang mendukung kredibilitas model secara keseluruhan. Untuk tujuan penambatan molekul, sifat fleksibel dan regulatoris LaeA menunjukkan bahwa kantong pengikat atau daerah alosterik dapat beradaptasi dengan interaksi ligan. Fleksibilitas ini dapat

menguntungkan untuk skrining senyawa yang menargetkan regulator epigenetik atau pensinyalan yang terlibat dalam metabolisme sekunder.

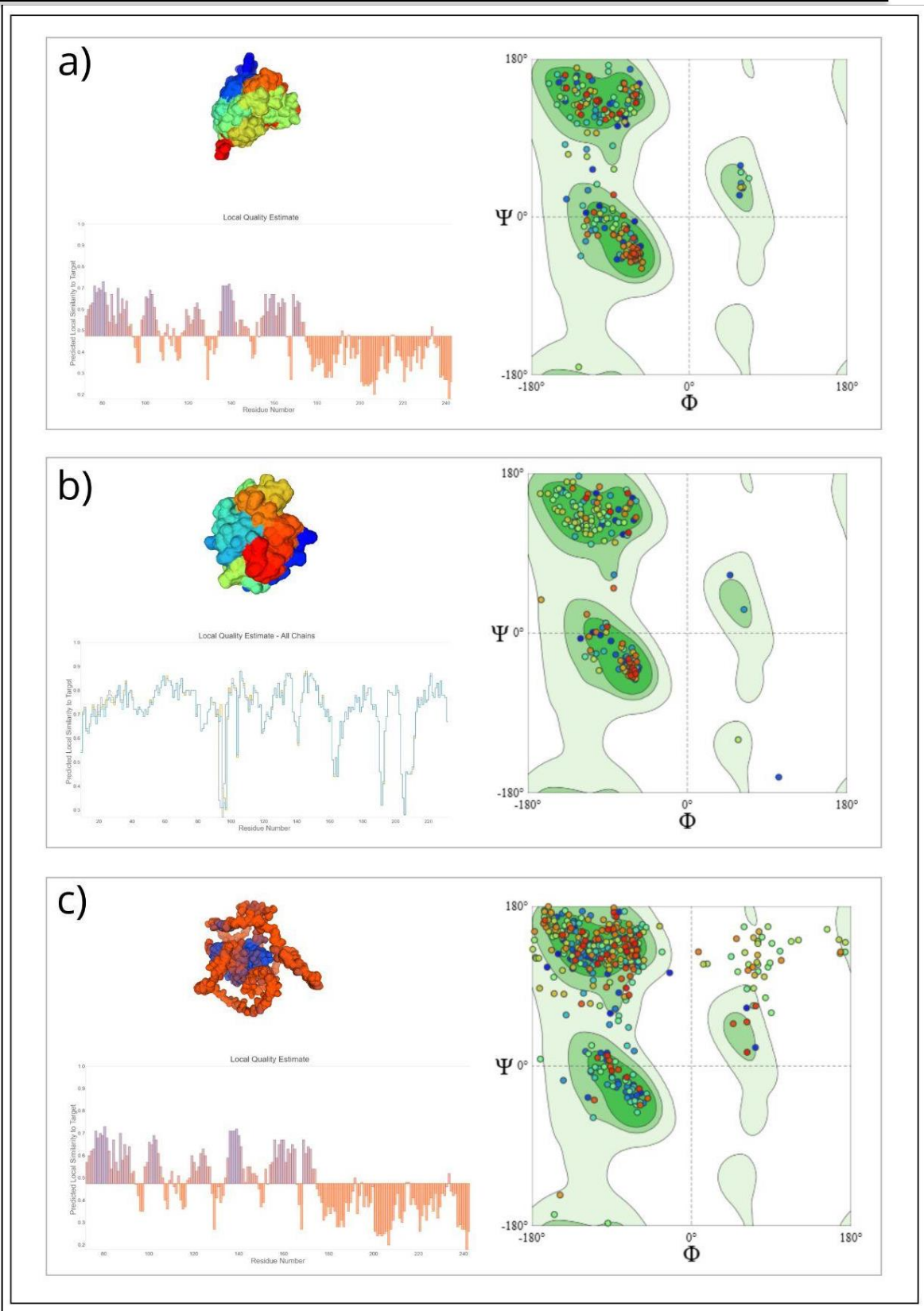
Protein Pep2, faktor patogenisitas kacang polong dari *Fusarium solani*, menunjukkan lipatan yang lebih kompak dan stabil dibandingkan dengan LaeA. Profil kualitas lokalnya tetap konsisten di seluruh sekuens, menunjukkan lebih sedikit daerah yang rentan terhadap gangguan dan keandalan stereokimia yang lebih tinggi. Analisis Ramachandran mendukung pengamatan ini dengan menunjukkan pengelompokan residu yang kuat dalam konformasi yang sesuai. Stabilitas struktural ini sangat penting untuk studi penambatan molekul, karena situs pengikatan yang andal dan terbentuk dengan baik memberikan keyakinan yang lebih besar dalam akurasi dan reproduktifitas docking. Sebagai protein efektor yang terlibat dalam patogenisitas, Pep2 merupakan target docking yang menjanjikan untuk mengidentifikasi molekul kecil yang dapat mengganggu interaksi inang-patogen. Ketahanan struktural model ini meningkatkan kemungkinan bahwa pengikatan ligan yang diprediksi akan mencerminkan interaksi yang relevan secara biologis.

Protein VeA dari *Fusarium oxysporum* f. sp. *lycopersici* menunjukkan profil struktural paling kompleks di antara ketiga model. Estimasi kualitas lokal menyoroti beberapa wilayah dengan keyakinan rendah, terutama pada domain yang diperluas, dan analisis Ramachandran mengungkapkan proporsi residu yang lebih tinggi dalam konformasi yang tidak diizinkan dibandingkan dengan LaeA dan Pep2. Fitur-fitur ini menunjukkan fleksibilitas substansial, yang konsisten dengan peran VeA sebagai regulator perkembangan. Untuk penambatan molekul, fleksibilitas ini menghadirkan tantangan sekaligus peluang. Di satu sisi, ketidakteraturan struktural dapat mengurangi keandalan prediksi penambatan. Di sisi lain, sifat dinamis VeA memungkinkannya mengakomodasi beragam ligan, menjadikannya pusat potensial untuk modulasi regulasi. Pendekatan penambatan fleksibel atau penambatan ansambel, yang

menggabungkan beberapa konformasi, mungkin diperlukan untuk prediksi akurat situs pengikatan ligan pada VeA.

Secara keseluruhan, hasil ini menunjukkan bahwa Pep2 menyediakan templat struktural yang paling andal untuk penambatan molekul, sementara LaeA dan VeA mengandung wilayah yang lebih fleksibel yang mencerminkan peran regulasinya. Stabilitas Pep2 meningkatkan keyakinan dalam prediksi docking-nya, terutama untuk penemuan inhibitor yang menargetkan patogenisitas yang dimediasi efektor. Sebaliknya, LaeA dan VeA mungkin memerlukan strategi docking yang lebih canggih yang memperhitungkan fleksibilitas protein tetapi dapat mengungkap situs pengikatan baru yang penting untuk aktivitas regulasi. Dari perspektif terapan, wawasan struktural ini tidak hanya memvalidasi penggunaan model-model ini untuk docking molekuler tetapi juga memandu pemilihan strategi docking dan interpretasi hasil. Pada akhirnya, kombinasi pemodelan struktural dan analisis docking ini dapat membantu mengidentifikasi kandidat molekul untuk mengendalikan patogenisitas *Fusarium* dan meningkatkan strategi perlindungan tanaman.

Dalam studi penambatan molekuler, memperhitungkan fleksibilitas melalui pendekatan penambatan fleksibel dan penambatan ansambel sangat penting untuk memprediksi lokasi pengikatan ligan secara akurat. Protein dan ligan pada dasarnya dinamis, mampu mengadopsi beberapa konformasi yang memengaruhi afinitas dan spesifisitas pengikatan. Teknik penambatan fleksibel mengatasi variabilitas ini dengan memungkinkan terjadinya gangguan pada geometri ligan dan struktur protein. Misalnya, BP-Dock menggabungkan fleksibilitas tulang punggung dan rantai samping pada reseptor, yang memungkinkan pemodelan interaksi protein-ligan kompleks secara lebih efektif daripada penambatan kaku (Bolia *et al.*, 2014). Strategi ini sangat berharga ketika berurusan dengan protein regulator atau pensinyalan, di mana pergeseran konformasi lokal sering kali menentukan stabilitas pengikatan ligan.



Gambar 1. Struktur model protein LaeA (a), Pep2 (b), dan VeA (c) dari *Fusarium* spp., dengan visualisasi permukaan, estimasi kualitas lokal, dan plot validasi Ramachandran.

Penambatan ansambel memperluas prinsip ini dengan menggunakan beberapa konformasi protein, yang biasanya berasal dari simulasi dinamika molekuler atau struktur eksperimental, untuk menangkap rentang peristiwa pengikatan yang lebih luas. Studi telah menunjukkan bahwa skrining berbasis ensemble secara konsisten mengungguli pendekatan struktur tunggal, terutama dalam identifikasi situs pengikatan yang lebih presisi (Atkovska et al., 2014; Kingsley et al., 2015; Nasr et al., 2013). Temuan tersebut menegaskan pentingnya integrasi antara prediksi berbasis struktur dan berbasis ligan untuk meningkatkan akurasi pengenalan situs pengikatan pada sitokrom P-450. Selain itu, dinamika protein juga memainkan peran krusial dalam menentukan keberhasilan proses docking.

Pendekatan ini khususnya relevan untuk protein yang secara intrinsik tidak teratur, di mana ligan dapat membentuk kembali lanskap konformasi ensemble apo (Dhar et al., 2025).

Sebagaimana disoroti oleh Srivastav et al (2016), masa depan perancangan obat berbantuan komputer bergantung pada metodologi docking yang secara eksplisit mengintegrasikan fleksibilitas, memastikan prediksi lebih selaras dengan realitas biologis.

Penambatan molekul

Hasil penambatan molekul fitokimia yang berasal dari kentang (*Solanum tuberosum*), singkong (*Manihot esculenta*), dan ubi ungu (*Dioscorea alata*) terhadap tiga protein *Fusarium*, yaitu LaeA (LAEA_FUSO4), Pep2 (PEP2_FUSSL), dan VeA (VEA_FUSO4), menunjukkan pola pengikatan yang berbeda, yang menyoroti perbedaan kapasitas senyawa-senyawa ini dalam memodulasi protein pengatur dan patogenisitas jamur sebagaimana yang tercantum pada Tabel 2. Afinitas pengikatan dan profil interaksi sangat bervariasi, bergantung pada metabolit dan protein target.

Tabel 2. Afinitas pengikatan senyawa fitokimia kentang, singkong, dan ubi ungu terhadap protein *Fusarium* spp

Sumber	Senyawa fitokimia	Afinitas pengikatan		
		LAEA_FUSO4	PEP2	veA_FUSO4
Kentang	Pyrogallol	-4.8	-5	-5.3
	Cyclogallipharol	-4.9	-5	-4.3
Singkong	Scopoletin	-5.2	-5.4	-5.5
	Linamarin	-5.1	-5.2	-4.7
Ubi ungu	Cyanidin-3-glucoside	-7.1	-7.2	-7.4
	Peonidin-3-glucoside	-6.7	-7.2	-7.4

Antara metabolit turunan kentang, pirogalol dan siklogallipharol menunjukkan afinitas pengikatan sedang, berkisar antara -4,3 hingga -5,3 kkal/mol (Tabel 3). Pirogalol berinteraksi dengan LaeA terutama melalui kontak π -alkil dan π -sigma hidrofobik yang melibatkan residu seperti ILE100 dan ALA91, dan dengan Pep2 melalui ikatan hidrogen yang melibatkan ARG43 dan TYR153. Pada VeA, ikatan hidrogen dengan ASP179 dan ASP166 berkontribusi terhadap stabilitas. Siklogallipharol juga mendukung interaksi penumpukan aromatik, melibatkan TRP153 pada LaeA dan PHE118 pada Pep2, sementara kontak alkil tambahan menstabilkan pengikatan dengan VeA, meskipun beberapa interaksi donor-donor yang tidak menguntungkan terdeteksi pada

ILE137. Hasil ini menunjukkan bahwa senyawa kentang bekerja terutama melalui interaksi hidrofobik dan aromatik, memberikan potensi penghambatan yang moderat terhadap target jamur.

Metabolit singkong menunjukkan aktivitas yang lebih luas dan pengikatan yang lebih kuat. Skopoletin menunjukkan afinitas antara -5,2 dan -5,5 kkal/mol pada ketiga protein tersebut (Tabel 3). Skopoletin membentuk beberapa ikatan hidrogen, termasuk dengan ASP104 dan SER147 pada LaeA, ARG29 dan THR97 pada Pep2, serta SER122 dan ILE137 pada VeA. Interaksi polar ini diperkuat oleh kontak π -alkil dan elektrostatik, menunjukkan bahwa skopoletin mungkin merupakan inhibitor yang efektif pada protein regulatori dan protein

terkait patogenisitas. Linamarin menghasilkan afinitas yang sedikit lebih lemah, berkisar antara –4,7 hingga –5,2 kkal/mol, tetapi membentuk ikatan hidrogen dengan residu seperti SER191 pada LaeA dan ALA86 pada Pep2, serta penumpukan π -alkil dengan residu triptofan TRP153 dan TRP196. Kemampuan ganda metabolit singkong untuk membentuk ikatan hidrogen dan kontak hidrofobik menunjukkan potensinya sebagai agen antijamur multitarget.

Antosianin ubi ungu menghasilkan afinitas pengikatan terkuat di antara semua senyawa yang diuji. Sianidin-3-glukosida dan peonidin-3-glukosida secara konsisten terikat pada kisaran -6,7 hingga -7,4 kkal/mol (Tabel 3 dan Gambar 2).

Sianidin-3-glukosida membentuk ikatan hidrogen yang ekstensif, seperti dengan ASP137 pada LaeA dan HIS5, TYR219, dan HIS203 pada Pep2, sekaligus membentuk kontak elektrostatik dan polar dengan ASP166, ASP179, dan GLY172 pada VeA. Peonidin-3-glukosida menunjukkan profil interaksi yang serupa, membentuk ikatan hidrogen dengan ALA189 dan ASN190 pada LaeA, LYS109 dan ASP98 pada Pep2, serta ASP179 dan TYR165 pada VeA. Afinitas tinggi dan kapasitas ikatan serbaguna dari antosianin dapat dikaitkan dengan struktur polihidroksilasi dan glikosilasinya, yang memfasilitasi banyak ikatan hidrogen simultan dan interaksi penumpukan hidrofobik.

Tabel 3. Pola interaksi senyawa fitokimia kentang, singkong, dan ubi ungu terhadap protein *Fusarium spp*

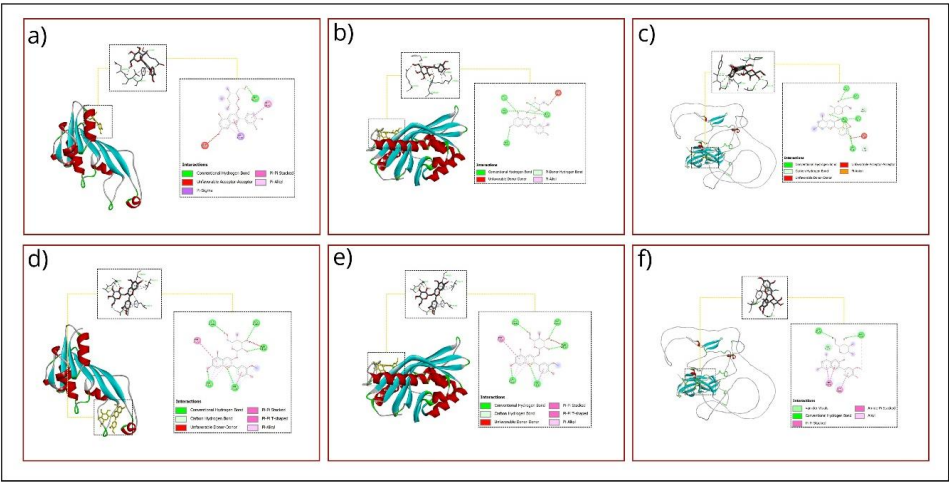
Sumber	Senyawa fitokimia	Protein target	Pola interaksi		
			Kategori	Tipe	Situs interaksi
Kentang	Pyrogallol	LAEA_FUSO4	Hydrophobic	Pi-Alkyl	ILE100
			Hydrophobic	Pi-Sigma	ALA91
			Hydrogen Bonds	Conventional Hidrogend Bond	ARG43, TYR153
		PEP2	Hydrophobic	Pi-Pi T-Shaped	TRP65
			Hydrophobic	Pi-Alkyl	ILE88
			Hydrophobic	Pi-Sigma	ILE114
			Hydrogen Bonds	Conventional Hidrogend Bond	ASP179, ASP166
		veA_FUSO4	Hydrogen Bonds	Carbon Hidrogend Bond	GLY177
			Hydrophobic	Pi-Pi Stacked	TYR165
			Hydrophobic	Pi-Pi T-shaped	TRP153
	Cyclogalliphar aol	LAEA_FUSO4	Hydrophobic	Alkyl	ARG187, CYS182, LYS195, ARG181
			Hydrophobic	Pi-Alkyl	LEU199
			Hydrophobic	Pi-Pi T-shaped	PHE118
		PEP2	Hydrophobic	Pi-Alkyl	PHE87, ALA191

		Hydrophobic	Alkyl	MET82
		Hydrophobic	Pi-Sigma	PHE87
		Other	Pi-Sulphur	MET192
		Donor Clash	Unfavorable Donor-Donor	GLN116
		Hydrogen bonds	Conventional Hydrogen Bond	SER122, ILE137
		Hydrophobic	Pi-Alkyl	CYS215, ALA125, ILE137
	veA_FUSO4	Hydrophobic	Alkyl	ARG216, PRO139, VAL119, ALA125, CYS215, VAL125
	LAEA_FUSO4	Donor Clash	Unfavorable Donor-Donor	ILE137
		Hydrogen Bonds	Carbon Hidrogend Bond	ASP104
		Hydrogen Bonds	Pi-Donor Hidrogend Bond	SER147
Singkong	Scopoletin	Hydrophobic	Pi-Sigma	LEU105
		Hydrophobic	Pi-Alkyl	LEU105, ILE124, LEU144
		Hydrogen Bonds	Carbon Hidrogend Bond	ARG33
		Hydrogen Bonds	Pi-Donor Hidrogend Bond	ARG29
	PEP2	Hydrogen Bonds	Conventional Hidrogend Bond	THR97
		Hydrophobic	Alkyl	ALA26
		Hydrophobic	Pi-Alkyl	ALA26, ARG29, LEU30

			Electrostatic	Pi-Cation	ARG23, ARG33
			Hydrogen Bonds	Conventional Hidrogend Bond	SER122, ILE137
			Other	Pi-Sulfur	CYS215
			Hydrophobic	Alkyl	PRO139, ARG216
			Hydrophobic	Pi-Alkyl	ALA125, ILE137, PRO139, ARG216
			Hydrogen Bonds	Conventional Hidrogend Bond	SER191, PRO188
			Hydrophobic	Alkyl	LYS195, LEU199
			Hydrophobic	Pi-Alkyl	TRP153, TRP196
			Hydrogen Bonds	Carbon Hidrogend Bond	ALA86
Linamarin	PEP2		Hydrophobic	Alkyl	ARG117
			Hydrophobic	Pi-Alkyl	PHE87
			Donor Clash	Unfavorable Donor-Donor	GLN116
	veA_FUSO4		Hydrogen Bonds	Conventional Hidrogend Bond	PHE82, PHE81
			Hydrogen Bonds	Carbon Hidrogend Bond	ASP79
			Hydrogen bonds	Conventional Hydrogen Bond	ASP137
			Hydrophobic	Pi-Pi Stacked	PHE170
	LAEA_FUSO4		Hydrophobic	Pi-Sigma	LEU138
			Hydrophobic	Pi-Alkyl	LEU138
			Acceptor Clash	Unfavorable Acceptor-Acceptor	GLU93

Peonidin-3-glucoside	PEP2	Hydrogen bonds	Conventional Hydrogen Bond	HIS5, TYR219, LYS109, HIS203
		Hydrogen bonds	Pi-Donor Hydrogen Bond	TYR219
		Hydrophobic	Pi-Alkyl	LYS109
		Donor Clash	Unfavorable Donor-Donor	ARG12
	veA_FUSO4	Hydrogen bonds	Conventional Hydrogen Bond	ASP166, ASP179, GLU177, ALA170, GLY172
		Hydrogen bonds	Carbon Hydrogen Bond	PRO176, TYR165
		Electrostatic	Pi-Anion	ASP179
		Acceptor Clash	Unfavorable Acceptor-Acceptor	ASP179
	LAEA_FUSO4	Donor Clash	Unfavorable Donor-Donor	ARG181
		Hydrogen bonds	Conventional Hydrogen Bond	ALA189, ASN190, HIS218, GLU186, VAL213
		Hydrogen bonds	Carbon Hydrogen Bond	HIS218
		Hydrophobic	Pi-Alkyl	HIS218, VAL213
	PEP2	Hydrophobic	Pi-Pi Stacked	HIS218
		Hydrophobic	Pi-Pi T-shaped	PHE227
		Donor Clash	Unfavorable Donor-Donor	ASN190
		Hydrogen bonds	Conventional Hydrogen Bond	LYS109, ASP98, TYR219

veA_FUSO4	Hydrogen bonds	Pi-Donor Hydrogen Bond	HIS203, TYR219
	Hydrophobic	Alkyl	LYYS111
	Hydrophobic	Pi-Alkyl	LEU7, LYS109
	Hydrophobic	Pi-Pi T-shaped	TYR219
	Donor Clash	Unfavorable Donor-Donor	ARG12
	Hydrogen bonds	Conventional Hydrogen Bond	ASP179, ALA170
	Hydrophobic	Alkyl	ALA170
	Hydrophobic	Amide-Pi Stacked	PRO176
	Hydrophobic	Pi-Pi Stacked	TYR165
	-	Van der Waals	GLY177



Gambar 2. Visualisasi docking sianidin-3-glukosida (a-c) dan peonidin-3-glukosida (d-f) dari ubi ungu dengan protein LaeA, Pep2, dan VeA dari *Fusarium* yang menunjukkan pengikatan stabil melalui ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik

Pengamatan ini menunjukkan bahwa afinitas pengikatan dan keragaman interaksi berkorelasi erat dengan kompleksitas struktural. Antosianin dari ubi ungu merupakan inhibitor yang paling menjanjikan, diikuti oleh skopoletin turunan singkong, sementara metabolit kentang menunjukkan aktivitas yang relatif moderat. Di

antara semua senyawa, Pep2 secara konsisten menunjukkan interaksi yang andal dan stabil, yang menyoroti kesesuaiannya sebagai target untuk penemuan inhibitor melalui penambatan molekul. LaeA dan VeA menunjukkan interaksi yang lebih bervariasi, yang mencerminkan fleksibilitas inherennya sebagai regulator global,

namun aktivitas antosianin yang kuat terhadap kedua protein tersebut menunjukkan bahwa regulator yang fleksibel sekalipun dapat ditargetkan secara efektif dengan ligan yang terstruktur dengan tepat.

Secara keseluruhan, hasil penelitian menunjukkan bahwa fitokimia dari tanaman pangan berpotensi mengganggu protein regulator dan patogen jamur. Interaksi kuat yang diamati dengan antosianin menunjukkan bahwa senyawa ini dapat dikembangkan menjadi agen antijamur alami, sementara metabolit singkong memberikan petunjuk tambahan untuk penghambatan multi-target. Metabolit kentang, meskipun kurang poten, mungkin masih berkontribusi pada pendekatan kombinatorial. Studi ini menetapkan dasar struktural untuk mengeksplorasi metabolit yang berasal dari tanaman sebagai strategi ramah lingkungan untuk menekan patogenisitas *Fusarium*.

Metodologi penambatan molekul, terutama bila dikombinasikan dengan pemodelan struktural, membantu menjelaskan dinamika interaksi protein-ligan. Sebagai contoh, metodologi seperti AutoDock telah digunakan secara efektif dalam studi docking untuk menilai afinitas pengikatan dan profil interaksi berbagai senyawa dengan protein target. Hal ini telah ditunjukkan dalam studi yang menyelidiki interaksi antara agen fitopatogen spesifik dan protein targetnya, sehingga mengidentifikasi molekul kandidat yang menjanjikan untuk perlindungan tanaman (Fan *et al.*, 2019). Dengan menerapkan docking molekuler sistematis dan validasi selanjutnya, para peneliti dapat menyempurnakan pendekatan mereka untuk menemukan agen antijamur baru (Verma *et al.*, 2021).

Lebih lanjut, integrasi penambatan molekul dengan bioinformatika dan validasi eksperimental menyediakan kerangka kerja yang kuat untuk merancang dan mengoptimalkan agrokimia yang bertujuan meminimalkan invasi patogen. Studi telah menunjukkan bahwa pendekatan interdisipliner ini tidak hanya memvalidasi hasil docking tetapi juga meningkatkan keandalan prediksi yang terkait dengan interaksi molekuler, yang pada akhirnya meningkatkan strategi perlindungan tanaman (Hussein *et al.*, 2024; Meng *et al.*, 2011). Dengan memahami dasar molekuler dari interaksi antara molekul kandidat dan patogen target, para

peneliti berada dalam posisi yang lebih baik untuk memilih strategi docking yang efektif dan menafsirkan hasil yang secara langsung memengaruhi kinerja pertanian (Hussein *et al.*, 2024).

Kesimpulan

Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa tanaman pangan umum seperti kentang, singkong, dan ubi ungu dapat menyediakan senyawa alami dengan potensi antijamur terhadap patogen *Fusarium*. Di antara ini, antosianin dari ubi ungu dan skopoletin dari singkong menunjukkan aktivitas penghambatan terkuat, yang menunjukkan bahwa tanaman ini dapat dieksplorasi sebagai sumber agen antijamur bioaktif yang ramah lingkungan. Tidak seperti fungisida sintesis, pendekatan berbasis fitokimia dapat mengurangi dampak lingkungan dan menurunkan risiko resistensi patogen. Uji coba eksperimental di masa depan dalam kondisi rumah kaca dan lapangan akan sangat penting untuk memvalidasi aplikasi praktis dan skalabilitasnya.

Ucapan Terima Kasih

Kami menghaturkan banyak terima kasih kepada Lembaga Penelitian dan Pengabdian Masyarakat (LPPM) Universitas Siliwangi yang telah rutin memfasilitasi dosen untuk melakukan penelitian dengan keterlibatan mahasiswa. Hasil penelitian ini didukung oleh pendanaan internal LPPM Unsil melalui skema Penelitian Dosen Pemula (PDP) Tahun 2025 dengan Nomor Kontrak 290/UN58.06/PM.00.00/2025.

Referensi

- Atkovska, K., Samsonov, S. A., Paszkowski-Rogacz, M., & Pisabarro, M. T. (2014). Multipose binding in molecular docking. *International Journal of Molecular Sciences*, 15(2), 2622–2645. <https://doi.org/10.3390/ijms15022622>
- Bisen, K., Pal, R. K., & Silas, V. J. (2023). Biofortified Vermicompost Mediated Induced Resistance Response in Tomato against *Fusarium oxysporum* f. sp. *lycopersici*. *International Journal of Environment and Climate Change*, 13(12),

- 735–751.
<https://doi.org/10.9734/ijecc/2023/v13i123736>
- Bolia, A., Gerek, Z. N., & Ozkan, S. B. (2014). BP-dock: A flexible docking scheme for exploring protein-ligand interactions based on unbound structures. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 54(3), 913–925.
<https://doi.org/10.1021/ci4004927>
- Dhar, A., Sisk, T. R., & Robustelli, P. (2025). Ensemble Docking for Intrinsically Disordered Proteins. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 65(13), 6847–6860.
<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5c00370>
- Ekwomadu, T. I., & Mwanza, M. (2023). Fusarium Fungi Pathogens, Identification, Adverse Effects, Disease Management, and Global Food Security: A Review of the Latest Research. *Agriculture (Switzerland)*, 13(9).
<https://doi.org/10.3390/agriculture13091810>
- Fan, J., Fu, A., & Zhang, L. (2019). Progress in molecular docking. *Quantitative Biology*, 7(2), 83–89.
<https://doi.org/10.1007/s40484-019-0172-y>
- Fraser-Smith, S., Czislowksi, E., Meldrum, R. A., Zander, M., O'Neill, W., Balali, G. R., & Aitken, E. A. B. (2014). Sequence variation in the putative effector gene SIX8 facilitates molecular differentiation of *Fusarium oxysporum* f. sp. *cubense*. *Plant Pathology*, 63(5), 1044–1052.
<https://doi.org/10.1111/ppa.12184>
- Hussain, M. A., Li, L., Kalu, A., Wu, X., & Naumovski, N. (2025). Sustainable Food Security and Nutritional Challenges. *Sustainability (Switzerland)*, 17(3), 1–14.
<https://doi.org/10.3390/su17030874>
- Hussein, B. R. M., Moustafa, A. H., Abdou, A., Drar, A. M., & Abdel-Raheem, S. A. A. (2024). Preparation, Agricultural Bioactivity Evaluation, Structure–Activity Relationships Estimation, and Molecular Docking of Some Quinazoline Compounds. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 72(16), 8973–8982.
<https://doi.org/10.1021/acs.jafc.3c08840>
- Ikyenge, B. A., Samoh, F. T., Agbidye, I. G., & Asogwa, N. (2024). Antifungal Activity of Ethanolic Extract of Potato Peels on Fungi Causing Rot in Mango Fruits. *Journal of Chemical Society of Nigeria*, 49(6), 885–895.
<https://doi.org/10.46602/jcsn.v49i6.1016>
- Kingsley, L. J., Wilson, G. L., Essex, M. E., & Lill, M. A. (2015). Combining structure- and ligand-based approaches to improve site of metabolism prediction in CYP2C9 substrates. *Pharmaceutical Research*, 32(3), 986–1001.
<https://doi.org/10.1007/s11095-014-1511-3>
- Kurnianingsih, N., Ratnawati, R., Nazwar, T. A., Ali, M., & Fatchiyah, F. (2021). Purple Sweet Potatoes from East Java of Indonesia Revealed the Macronutrient, Anthocyanin Compound and Antidepressant Activity Candidate. *Medical Archives*, 75(2), 94–100.
<https://doi.org/10.5455/medarh.2021.75.94-100>
- Kusch, S., Qian, J., Loos, A., Kümmel, F., Spanu, P. D., & Panstruga, R. (2023). Long- term and rapid evolution in powdery mildew fungi. *Molecular Ecology*, 33.
<https://doi.org/10.1111/mec.16909>
- Madhushan, A., Weerasingha, D. B., Ilyukhin, E., Taylor, P. W. J., Ratnayake, A. S., Liu, J. K., & Maharachchikumbura, S. S. N. (2025). From Natural Hosts to Agricultural Threats: The Evolutionary Journey of Phytopathogenic Fungi. *Journal of Fungi*, 11(1), 1–29.
<https://doi.org/10.3390/jof11010025>
- Meng, X.-Y., Zhang, H.-X., Mezei, M., & Cui, M. (2011). Molecular Docking: A Powerful Approach for Structure-Based Drug Discovery. *Current Computer Aided-Drug Design*, 7(2), 146–157.
<https://doi.org/10.2174/157340911795677602>
- Merhej, J., Urban, M., Dufresne, M., Hammond-Kosack, K. E., Richard-Forget, F., & Barreau, C. (2012). The velvet gene, FgVe1, affects fungal development and positively regulates trichothecene biosynthesis and pathogenicity in *Fusarium graminearum*. *Molecular Plant Pathology*, 13(4), 363–374.
<https://doi.org/10.1111/j.1364-3703.2011.00755.x>

- Mohidin, S. R. N. S. P., Moshawih, S., Hermansyah, A., Asmuni, M. I., Shafqat, N., & Ming, L. C. (2023). Cassava (*Manihot esculenta* Crantz): A Systematic Review for the Pharmacological Activities, Traditional Uses, Nutritional Values, and Phytochemistry. *Journal of Evidence-Based Integrative Medicine*, 28, 2515690X231206227. <https://doi.org/10.1177/2515690X231206227>
- Nasr, B. N., Guillemain, H., Lagarde, N., Zagury, J. F., & Montes, M. (2013). Multiple structures for virtual ligand screening: Defining binding site properties-based criteria to optimize the selection of the query. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 53(2), 293–311. <https://doi.org/10.1021/ci3004557>
- Pan, K., Chen, J., Li, H., Xu, S., Wang, J., Yan, X., Zhao, Y., Jiang, H., Khan, A., Tahir Khan, M., Powell, C. A., Wen, R., & Zhang, M. (2025). Genomic and metabolomic insights into the biocontrol potential of *Bacillus velezensis* ZHR0 against sugarcane smut. *Frontiers in Microbiology*, 16(May), 1–17. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2025.1582763>
- Pfordt, A., Romero, L. R., Schiwiek, S., Karlovsky, P., & von Tiedemann, A. (2020). Impact of environmental conditions and agronomic practices on the prevalence of fusarium species associated with ear-and stalk rot in maize. *Pathogens*, 9(3), 1–17. <https://doi.org/10.3390/pathogens9030236>
- Resiani, N. M. D., Suryathi, N. W., & Iswara, P. G. A. R. (2025). Management of Major Pests and Diseases of Shallots by Utilizing Local - Natural Resources Towards a Sustainable Environment. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 1452(1). <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1452/1/012026>
- Ribeiro, J. A., Albuquerque, A., Materatski, P., Patanita, M., Varanda, C. M. R., Félix, M. D. R., & Campos, M. D. (2022). Tomato Response to *Fusarium* spp. Infection under Field Conditions: Study of Potential Genes Involved. *Horticulturae*, 8(5), 1–13. <https://doi.org/10.3390/horticulturae8050433>
- Samoh, F., Aloo, B., Isaac, A., & Nguemo, T. (2025). GC-MS Profile and Antibacterial Evaluation of the Ethanolic Extracts of Banana and Sweet Potato Peels. *ChemClass Journal*, 9, 660–671. <https://doi.org/10.33003/chemclass-2025-0902/187>
- Savary, S., Willocquet, L., Pethybridge, S. J., Esker, P., McRoberts, N., & Nelson, A. (2019). The global burden of pathogens and pests on major food crops. *Nature Ecology and Evolution*, 3(3), 430–439. <https://doi.org/10.1038/s41559-018-0793-y>
- Srinivas, C., Nirmala Devi, D., Narasimha Murthy, K., Mohan, C. D., Lakshmeesha, T. R., Singh, B. P., Kalagatur, N. K., Niranjana, S. R., Hashem, A., Alqarawi, A. A., Tabassum, B., Abd Allah, E. F., & Chandra Nayaka, S. (2019). *Fusarium oxysporum* f. sp. *lycopersici* causal agent of vascular wilt disease of tomato: Biology to diversity– A review. *Saudi Journal of Biological Sciences*, 26(7), 1315–1324. <https://doi.org/10.1016/j.sjbs.2019.06.002>
- Srivastav, V. K., Singh, V., & Tiwari, M. (2016). *Recent Advancements in Docking Methodologies*. <https://doi.org/10.4018/978-1-5225-0115-2>
- Suarez, P. E. G., Siciliano, A., Spampinato, M., Maione, A., Guida, M., Libralato, G., & Galdiero, E. (2024). Ecotoxicity and Mutagenicity Assessment of Novel Antifungal Agents VT-1161 and T-2307. *Molecules*, 29(19), 1–10. <https://doi.org/10.3390/molecules29194739>
- Uwineza, P. A., Kwiatkowska, M., Gwiazdowski, R., Stępień, Ł., Bryła, M., & Waśkiewicz, A. (2024). Field Assessment of *Lamium album* in Reducing Mycotoxin Biosynthesis in Winter Wheat Infected by *Fusarium culmorum*. *Agriculture (Switzerland)*, 14(5), 1–13. <https://doi.org/10.3390/agriculture14050647>
- Verma, A. K., Majid, A., Hossain, S., Ahmed, S. F., Ashid, M., Bhojiya, A. A., Ameta, S., Upadhyay, S. K., K. Srivastava, A., Kumar, N., Vishvakarma, Yadav, V. K., Teli, P. K., Harina, & Alam, M. (2021). *Identification of 1 , 2 , 4-triazine and its derivatives*

-
- against Lanosterol 14 - demethylase (CYP51) property of Candida albicans : Influence on the development of new antifungal therapeutic strategies. August.* <https://doi.org/10.20944/preprints202108.0359.v1>
- Wang, G., Zhang, H., Wang, Y., Liu, F., Li, E., Ma, J., Yang, B., Zhang, C., Li, L., & Liu, Y. (2019). Requirement of LaeA, VeA, and VelB on Asexual Development, Ochratoxin A Biosynthesis, and Fungal Virulence in *Aspergillus ochraceus*. *Frontiers in Microbiology*, 10(November), 1–10. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2019.02759>
- Wang, J., Li, C., Qiu, R., Li, X., Zhao, J., Bai, J., Chen, Y., & Li, S. (2021). Complete genome sequence of a novel mitovirus from the phytopathogenic fungus *Fusarium oxysporum*. *Archives of Virology*, 166(11), 3211–3216. <https://doi.org/10.1007/s00705-021-05210-y>