

ABSTRAK

Linda Rosita, NIM. 8236147001 (2025). Potensi Fraksi N-Heksan, Etil Asetat, dan Etanol dari Kayu Secang (*Caesalpinia sappan L.*) sebagai Agen Antibakteri: Studi Secara *In Vitro* dan *In Silico*

Tujuan: Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi fraksi n-heksan, etil asetat, dan etanol dari kayu secang (*Caesalpinia sappan L.*) sebagai antibakteri secara *in vitro* dan *in silico*.

Metode: Ekstraksi dilakukan dengan metode maserasi menggunakan pelarut n-heksan, etil asetat, dan etanol diikuti dengan fraksinasi kromatografi kolom gravitasi (KKG). Secara *in vitro*, aktivitas antibakteri diuji menggunakan metode difusi cakram dan mikrodilusi untuk menentukan konsentrasi hambat minimum (KHM) dan konsentrasi bunuh minimum (KBM) terhadap bakteri *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 dan *Salmonella enterica* ATCC 14028. Secara *in silico*, aktivitas antibakteri dilakukan melalui *molecular docking* dengan software *PyRx Autodock Vina* terhadap reseptor *DNA gyrase B* (PDB ID : 3U2D) dan *DNA gyrase B* (PDB ID : 6J90). **Hasil:** Diameter zona hambat pada fraksi n-heksan menunjukkan aktivitas terbaik terhadap bakteri *S. aureus* sebesar 11 mm dan *S. enterica* sebesar 10,7 mm, pada fraksi 3 etil asetat menunjukkan aktivitas terbaik terhadap bakteri *S. aureus* sebesar 16,6 mm dan *S. enterica* sebesar 15,5 mm, pada fraksi 3 etanol menunjukkan aktivitas terbaik terhadap bakteri *S. aureus* sebesar 13 mm dan *S. enterica* sebesar 1,34 mm. Fraksi n-heksan, etil asetat, dan etanol masing-masing memiliki zona hambat yang sedang-kuat terhadap kedua bakteri uji. Hasil KHM pada fraksi n-heksan menunjukkan aktivitas antibakteri terbaik terhadap bakteri *S. aureus* sebesar 312,5 µg/mL dan *S. enterica* sebesar 156,25 µg/mL, pada fraksi 3 etil asetat menunjukkan aktivitas terbaik terhadap bakteri *S. aureus* sebesar 39,062 µg/mL dan *S. enterica* sebesar 19,53 µg/mL, pada fraksi 3 etanol menunjukkan aktivitas terbaik terhadap bakteri *S. aureus* sebesar 625 µg/mL dan *S. enterica* sebesar 312,5 µg/mL. Hasil analisis GC-MS pada fraksi n-heksan teridentifikasi senyawa utama yang bersifat antibakteri yaitu xanthorrhizol. Hasil analisis LC-MS/MS pada fraksi 3 etil asetat teridentifikasi senyawa utama yang bersifat antibakteri yaitu brazilin. Hasil analisis LC-MS/MS pada fraksi 3 etanol teridentifikasi senyawa utama yang bersifat antibakteri yaitu brazilein. Senyawa utama hasil analisis GC-MS dan LC-MS/MS dijadikan ligan uji untuk selanjutnya dilakukan *uji in silico* dimana semakin negatif nilai *binding affinity* maka semakin stabil ikatan antara ligan dan reseptor, untuk reseptor *DNA gyrase B* 3U2D adalah brazilein sebesar -6,0 kkal/mol, sedangkan *binding affinity* paling negatif/stabil untuk reseptor *DNA gyrase B* 6J90 adalah brazilin sebesar -9,0 kkal/mol. Hasil prediksi fisikokimia menunjukkan bahwa semua senyawa aktif *C. sappan L.* memiliki nilai yang baik dan juga memenuhi aturan dari *Lipinski rules of five* sehingga dapat dijadikan sebagai kandidat obat. **Kesimpulan:** fraksi n-heksan, etil asetat, dan etanol dari kayu secang memiliki potensi sebagai antibakteri secara *in vitro* dan secara *in silico* senyawa aktif kayu secang berpotensi menghambat aktivitas protein *DNA gyrase B* ID 3U2D dan *DNA gyrase B* ID 6J90.

Kata kunci : antibakteri, *Caesalpinia sappan L.*, fraksinasi KKG, GC-MS, *in vitro*, *in silico*, LC-MS/MS

ABSTRACT

Linda Rosita, NIM. 8236147001. (2025). Potensi Fraksi N-Heksan, Etil Asetat, dan Etanol dari Kayu Secang (*Caesalpinia sappan L.*) sebagai Agen Antibakteri: Studi Secara *In Vitro* dan *In Silico*

Objective: This study aims to determine the potential of n-hexane, ethyl acetate, and ethanol fractions of secang wood (*Caesalpinia sappan L.*) as antibacterial in vitro and in silico. **Methods:** Extraction was performed by maceration method using n-hexane, ethyl acetate, and ethanol solvents followed by gravity column chromatography (GCG) fractionation. In vitro, antibacterial activity was tested using disc diffusion and microdilution methods to determine the minimum inhibitory concentration (KHM) and minimum killing concentration (KBM) against *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 and *Salmonella enterica* ATCC 14028 bacteria. In silico, antibacterial activity was performed through molecular docking with PyRx Autodock Vina software against DNA gyrase B receptor (PDB ID: 3U2D) and DNA gyrase B (PDB ID: 6J90). **Results:** The diameter of the inhibition zone in the n-hexane fraction showed the best activity against *S. aureus* bacteria by 11 mm and *S. enterica* by 10.7 mm, in the 3 ethyl acetate fraction showed the best activity against *S. aureus* bacteria by 16.6 mm and *S. enterica* by 15.5 mm, in the 3 ethanol fraction showed the best activity against *S. aureus* bacteria by 13 mm and *S. enterica* by 1.34 mm. The n-hexane, ethyl acetate, and ethanol fractions each have a strong inhibition zone against both test bacteria. KHM results in the n-hexane fraction showed the best antibacterial activity against *S. aureus* bacteria at 312.5 µg/mL and *S. enterica* at 156.25 µg/mL, in fraction 3 ethyl acetate showed the best activity against *S. aureus* bacteria at 39.062 µg/mL and *S. enterica* at 19.53 µg/mL, in fraction 3 ethanol showed the best activity against *S. enterica* bacteria at 312.5 µg/mL. The results of GC-MS analysis on the n-hexane fraction identified the main compound that is antibacterial, namely xanthorrhizol. The results of LC-MS / MS analysis on the ethyl acetate fraction 3 identified the main compounds that are antibacterial, namely brazilin. The results of LC-MS/MS analysis on fraction 3 ethanol identified the main compounds that are antibacterial, namely brazilein. The main compounds of GC-MS and LC-MS/MS analysis results are used as test ligands for further in silico testing where the more negative the binding affinity value, the more stable the bond between protein and receptor, for DNA gyrase receptor B 3U2D is brazilein at -6.0 kcal/mol, while the most negative/stable binding affinity for DNA gyrase receptor B 6J90 is brazilin at -9.0 kcal/mol. The physicochemical prediction results show that all active compounds of *C. sappan L.* have good values and also meet the rules of the Lipinski rules of five so that they can be used as drug candidates. **Conclusion:** n-hexane, ethyl acetate, and ethanol fractions of secang wood have potential as antibacterial in vitro and in silico active compounds of secang wood have the potential to inhibit the activity of DNA gyrase B ID 3U2D and DNA gyrase B ID 6J90 proteins

Keywords: antibacterial, *Caesalpinia sappan L.*, in vitro, in silico, KKG fractionation, GC-MS, LC-MS/MS