

**IDENTIFIKASI SENYAWA TURUNAN PIGMEN  
*MONASCUS* SP YANG BERPOTENSI SEBAGAI ANTIOKSIDAN  
SECARA *IN SILICO* PADA  
RESEPTOR PEROXIDASE 5**

**SKRIPSI**

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar  
Sarjana Farmasi Program Studi S1 Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada**

**PEGI PATMAWATI  
31117129**



**PROGRAM STUDI S1-FARMASI  
SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN BAKTI TUNAS HUSADA TASIKMALAYA  
2021**

## ABSTRAK

### Identifikasi Senyawa Turunan Pigmen *Monascus* sp. yang berpotensi Sebagai Antioksidan Secara *In Silico* Pada Reseptor Peroxidase 5

Pegi Patmawati

Program Studi S-1 Farmasi, STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

#### Abstrak

Angkak merupakan produk fermentasi dari beras oleh *Monascus* sp, digunakan sebagai salah satu bahan pangan sumber antioksidan alami yang banyak dikembangkan karena mengandung metabolit sekunder salah satunya yaitu pigmen. *Monascus* sp. menghasilkan 6 pigmen utama: pigmen merah (monascorubramine dan rubropunctamine), pigmen kuning (monascin dan ankaflavin), dan pigmen oranye (rubropunctatin dan monascorubrin). Saat ini hampir 57 pigmen baru telah ditemukan, namun informasi terkait efek biologisnya masih terbatas. Tujuan penelitian ini mengetahui turunan pigmen *Monascus* sp. yang memiliki potensi sebagai antioksidan melalui studi *in silico*. Penelitian ini menggunakan 57 senyawa turunan pigmen *Monascus* sp. dengan tocopherol sebagai kontrol positifnya. Data hasil simulasi berupa nilai energi konformasi (kcal/mol), ikatan hidrogen, dan kesamaan asam amino yang menunjukkan kestabilan interaksi senyawa uji terhadap asam amino pada reseptor. Berdasarkan hasil docking dilihat nilai *binding affinity* secara berturut-turut senyawa ligan uji Isolate Mps 4, Monasflour B dan Monascuskaodione A adalah -10,29: -9,36: -9,30 kkal/mol lebih rendah dari senyawa pembanding tocopherol -9,25 yang berarti ketiga senyawa tersebut mempunyai interaksi lebih baik daripada senyawa pembanding. Hasil *molecular dynamic* menunjukkan dari 3 senyawa yang disimulasikan berdasarkan *Ramachandran plot* pada suhu 310°K memiliki kestabilan yang baik sehingga senyawa tersebut dapat digunakan sebagai kandidat yang berpotensi sebagai antioksidan.

**Kata kunci:** Antioksidan, Azaphilone, *In Silico*, *Monascus* sp.

#### Abstract

Angkak was a fermented product of rice by *Monascus* sp. which used as one of natural antioxidant sources that widely developed since it contains secondary metabolites, one of which was pigment. *Monascus* sp. produces six main pigments: red pigments (monascorubramine and rubropunctamine), yellow pigments (monascin and ankaflavin), and orange pigments (rubropunctatin and monascorubrin). Currently, 57 new pigments have been discovered, but information regarding their biological effects was still limited. The purpose of this research was to determine the derivative pigments of *Monascus* sp. which has a potential as an antioxidant through *in silico* studies. This research used 57 derivative compounds of *Monascus* sp. pigments with tocopherol as the positive control. The results of data simulation showed in the form of conformational energy values (kcal/mol), hydrogen bonds, and amino acid similarity which indicate the stability of the interaction of the test compound to amino acids in the receptor. Based on the docking results, the binding affinity values for the test ligand compounds Isolate Mps 4, Monasflour B and Monascuskaodione A, respectively, were -10.29: -9.36: -9.30 kcal/mol lower than the comparison compound tocopherol -9, 25 which means three compounds have better interactions than comparison compound. The results of molecular dynamics showed that three compounds was simulated based on Ramachandran Plot at a temperature of 310° K have a good stability with the result so that these compounds can be used as potential candidates as antioxidants.

**Keywords:** Antioxidant, Azaphilone, *In Silico*, *Monascus* sp.

## HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi/Tugas akhir ini diajukan oleh :

Nama : Pegi Patmawati  
NIM : 31117129  
Program Studi : S1-Farmasi  
Judul Tugas Akhir : Identifikasi Senyawa Turunan Pigmen *Monascus* sp. yang Berpotensi Sebagai Antioksidan Secara *In Silico* Pada Reseptor Peroxidase 5

Telah berhasil dipertahankan dihadapan Dewan Penguji, telah diperbaiki sesuai dengan saran dari tim penguji serta diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar  
Sarjana Farmasi  
Pada Program Studi Farmasi  
STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

### DEWAN PENGUJI

Pembimbing 1 : Dr. Hj. Anna Yuliana, M.Si (.....)  
Pembimbing 2 : Dr.apr. Saeful Amin, M.Si (.....)  
Penguji : Winda Trisna Wulandari, M.Si (.....)

Ditetapkan di : Tasikmalaya

Tanggal : 10 Agustus 2021