

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA TURUNAN PIGMEN *Monascus*
sp. SEBAGAI ANTICORONA VIRUS**

SKRIPSI

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

SEPTIAN DWI MULYANA

31117189



**PROGRAM STUDI S-1 FARMASI
SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN
BAKTI TUNAS HUSADA TASIKMALAYA
2021**

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* SENYAWA TURUNAN PIGMEN *Monascus sp.* SEBAGAI KANDIDAT ANTICORONA VIRUS

Septian Dwi Mulyana

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

Corona Virus (CoV) adalah virus keluarga besar dengan penyebab penyakit mulai dari gejala ringan hingga berat. *Monascus sp.* merupakan kapang yang digunakan untuk memfermentasi beras putih sehingga menghasilkan beras merah (*Red Yeast Ric*) yang berpotensi sebagai *Nutraceutical*. Studi mengenai *Monascus sp.* berkembang dengan cepat, tercantum temuan pigmen baru, yaitu lima puluh tujuh turunan pigmen *Monascus sp.* Maka dari itu peneliti melakukan studi *in Silico* senyawa turunan pigmen dari *Monascus sp.* yang memberikan potensi sebagai kandidat anticorona virus dengan pengujian secara *in Silico*. Kode 5LHD dan 6VW1 digunakan sebagai reseptor anticorona virus. Prosedur penelitian yang dilakukan seperti preparasi ligan, *drug scan*, PreADME, uji toksisitas, preparasi reseptor, validasi metode *docking*, *docking* ligan uji dan visualisasi hasil, analisis hasil serta *molekular dinamik*. *Software* yang digunakan yaitu chemBraw 3D, MarvinSketch, Autodock, MMV, Discovery Studio, Toxtree, MOE serta *software* berbasis online seperti PreADME dan PDB. Didapatkan hasil analisis bahwa senyawa turunan pigmen *Monascus sp.* rata - rata memiliki nilai *binding affinity* yang kecil, namun senyawa *Monankarin E* memiliki nilai *binding affinity* (5LHD:-8.7 kkal/mol) yang sangat baik sehingga dari senyawa tersebut kemudian di bandingkan dengan senyawa pembanding nya, yaitu ligan alami dari reseptor anticorona virus (5LHD:-3.4 kkal/mol). Dapat disimpulkan bahwa senyawa *Monankarin E* dari turunan pigmen *Monascus sp.* dapat memberikan potensi yang baik untuk dijadikan sebagai kandidat anticorona virus.

Kata Kunci: Pigmen *Monascus sp.*, Anticorona Virus, dan *in Silico*.

ABSTRAK

Corona Virus (CoV) is biggest family of viruses with causes of illness ranging from mild to severe symptoms. *Monascus sp.* is used to ferment white rice to produce brown rice (*R Yeast Ric*) which has the potential as a *Nutraceutical*. Studies on *Monascus sp.* developing rapidly, including the discovery of new pigments, namely fifty-seven derivatives of the pigment *Monascus sp.* Therefore, the researchers conducted a study on *Silico* pigment-derived compounds from *Monascus sp.* which provides potential as a candidate for the corona virus by testing in *Silico*. Codes 5LHD and 6VW1 were used as anticorona virus receptors. The research procedures were carried out such as ligand preparation, drug scan, PreADME, toxicity test, receptor preparation, validation of the docking method, test ligand docking and visualization of results, analysis of results and molecular dynamics. The software used is chemBraw 3D, MarvinSketch, Autodock, MMV, Discovery Studio, Toxtree, MOE and online-based software such as PreADME and PDB. The results of the analysis showed that the compounds derived from *Monascus sp.* On average it has a small binding affinity value, but the *Monankarin E* compound has a so good binding affinity value (5LHD: -8.7 kkal/mol) So that compound is compared with this comparison compound, which is a natural ligand from the anticorona virus receptor (5LHD: -3.4 kkal/mol). The conclusion that the compound *Monankarin E* from the pigment derivative *Monascus sp.* can provide good potential to use as a candidate for the anticorona virus.

Keywords: Pigment *Monascus sp.*, Anticorona Virus, and *in Silico*