

**OPTIMASI SITRININ HASIL FERMENTASI *Monascus sp*
SEBAGAI ANTIMIKROBA SECARA *IN SILICO***

SKRIPSI

**Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat guna menempuh Ujian Sarjana
pada Program Studi S1 Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada**

PARAS LAYNA SAFA

31117033



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

ABSTRAK

Optimasi Sitrinin Hasil Fermentasi *Monascus sp* Sebagai Antimikroba Secara *In Silico*

Paras Layna Safa

S1 Farmasi, STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Monascus sp dapat ditemukan dalam beras ragi merah dapat disebut dengan nama lain sebagai beras merah Cina karena produknya berwarna merah. *Monascus sp* dapat menghasilkan metabolit sekunder yaitu Monakolin K, pigmen dan Sitrinin. Sitrinin merupakan senyawa mikotoksin diproduksi oleh *Monascus sp* yang memiliki sifat nefrotoksik dan hepatotoksik. Penelitian dilakukan secara *studi in silico* senyawa Sitrinin bertujuan untuk memprediksi potensi senyawa Sitrinin pada *Monascus sp* sebagai antimikroba. 29 kode reseptor antimikroba. 1 senyawa uji dilakukan preparasi ligan menggunakan software *ChemDraw*, *MarvinSketch*, prediksi ADME dan toksisitas menggunakan *pkCSM Online Tool*. Proses *docking* menggunakan software *AutodockTools 1.5.6*. Validasi *docking* diperoleh nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*) 2.530Å. Analisis hasil *docking* dilihat nilai *binding affinity* senyawa Sitrinin terhadap reseptor 3FL9 -9.26 kkal/mol. Hasil simulasi dinamika molekul pada suhu 300K selama 100ps interaksi tetap stabil. Berdasarkan *studi in-silico*, senyawa Sitrinin terhadap reseptor 3FL9 diprediksikan sebagai kandidat reseptor antibakteri.

Kata Kunci: Antimikroba, *in silico*, *Monascus sp*, senyawa Sitrinin..

Abstract

Monascus sp can be found in red yeast rice, or formerly known as Chinese brown rice because the product is red in color. *Monascus sp* can produce secondary metabolites, such as Monacolin K, pigment and citrinin. Citrinin is a mycotoxin produced by *Monascus sp* which has nephrotoxic and hepatotoxic characteristics. The research was conducted by *in silico* study of citrinin compounds aimed to predict the potential of citrinin compounds in *Monascus sp* as antimicrobials. 28 antimicrobial receptor codes. One test compound was conducted by using the *ChemDraw* software, *MarvinSketch*, ADME and toxicity prediction was conducted by using *pkCSM Online Tool*, *MOE-dynamic 2008.10*. *Docking* process used *AutodockTools 1.5.6* software. *Docking* validation obtained RMSD (*Root Mean Square Deviation*) value of 2,530. Analysis of the *docking* results were seen the value of the *binding affinity* of the citrinin compound to the 3FL9 receptor -9.26 kcal/mol. *Molecular dynamics* simulation results at a temperature of 300K for 100ps interaction remained stable. Based on *in-silico* studies, Citrinin compounds towards the 3FL9 receptor are predicted as a candidate of antibacterial receptors.

Key word: , Antimicrobials, Citrinin compounds, *in-silico*, *Monascus sp*..