

***STUDY MOLECULAR DOCKING* PIGMEN
SENYAWA TURUNAN *Monascus* sp.
SEBAGAI *INHIBITOR* HEPATITIS B**

SKRIPSI



**DIKRI FADHLURROHMAN
31118077**

**PROGRAM STUDI S-1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
OKTOBER 2022**

***STUDY MOLECULAR DOCKING* PIGMEN
SENYAWA TURUNAN *Monascus* sp
SEBAGAI *INHIBITOR* HEPATITIS B**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana



**DIKRI FADHLURROHMAN
31118077**

**PROGRAM STUDI S-1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
OKTOBER 2022**

ABSTRAK

*Study Molecular Docking Pigmen Senyawa Turunan *Monascus* Sp Sebagai Inhibitor Hepatitis B*

Dikri Fadhlurrohman

Program Studi S-1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Pigmen merupakan zat warna yang berasal dari kapang *Monascus* sp yang diketahui memiliki berbagai aktivitas salah satunya sebagai antivirus. Digunakan protein virus hepatitis B dengan kode protein 5GMZ yang akan digunakan sebagai target *molecular docking*. Metode yang digunakan adalah *molecular docking*, hasil menunjukkan bahwa dari kelima ligan uji *Monascin* merupakan senyawa dengan aktivitas terbaik sebagai *inhibitor* hepatitis B dengan binding energi -7.96 kkal/mol dan Ki 1.46 uM serta terdapat interaksi dengan protein virus hepatitis B melalui pembentukan ikatan hidrogen dan ikatan hidropobik. Hasil *drugscan* menunjukkan kelima senyawa memenuhi semua parameter *Lipinski's rule of five*. Hasil parameter farmakokinetik pada profil absorpsi kelima senyawa diprediksi memiliki penetrasi dan penyerapan yang baik, pada profil distribusi kelima senyawa diprediksi terdistribusi secara merata ke plasma darah serta ke jaringan, kelima senyawa diprediksi dapat menembus sawar darah otak, pada profil metabolisme dari kelima ligan uji diprediksi hanya satu senyawa yang tidak dimetabolisme di hati dan pada profil ekskresi dari kelima senyawa dua di antaranya diprediksi dapat berpotensi menyebabkan efek samping. Hasil *molecular dynamic* menunjukkan bahwa grafik RMSD dari senyawa *Monascin* hanya stabil pada awal simulasi dengan rata - rata RMSD 2.1 Å dan pada parameter RMSF senyawa *Monascin* memiliki fluktuasi terendah pada asam amino PHE103.

Kata Kunci: Pigmen *Monascus* sp, *molecular docking*, Hepatitis B, *drugscan*, parameter farmakokinetik, *molecular dynamic*

Abstract

*Pigment is a dye derived from the mold of *Monascus* sp which is known to have various activities, one of which is as an antivirus. Hepatitis B virus protein with protein code 5GMZ is used as a target molecular docking. The method used is molecular docking, the results show that of the five ligands of the *Monascin* test is the compound with the best activity as a hepatitis B inhibitor with energy binding of -7.96 kcal / mol and Ki 1.46 uM and there is an interaction with the hepatitis B virus protein through the formation of hydrogen bonds and hydrophobic bonds. Result drugscan indicates all five compounds meet all parameters of Lipinski's rule of five. Hasil pharmacokinetic parameters in the absorption profile of the five compounds are predicted to have good penetration and absorption, in the*

distribution profile of the five compounds are predicted to be evenly distributed to the blood plasma as well as to the tissues, the five compounds are predicted to penetrate the blood brain barrier, on the metabolic profile of the five test ligands it is predicted that only one compound is applied not metabolized in the liver and on the excretory profile of all five compounds two of which are predicted to potentially cause side effects. Molecular dynamic results showed that the RMSD chart of the Monascin compound was only stable at the beginning of the simulation with an average RMSD of 2.1 Å and on the RMSF parameter of the Monascin compound, it had the lowest fluctuations in the amino acid PHE103.

Keywords: Monascus sp pigment, molecular docking, Hepatitis B, drugscan, pharmacokinetic parameters, molecular dynamic