

**ANALISIS SIFAT FARMAKOKINETIK DAN TOKSISITAS  
PADA MODIFIKASI SALAH SATU GUGUS ALKIL  
SENYAWA SITRININ SECARA KOMPUTASI**

**SKRIPSI**



**YONI AGAM PUTRATAMA  
31118125**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA  
OKTOBER 2022**

**ANALISIS SIFAT FARMAKOKINETIK DAN TOKSISITAS  
PADA MODIFIKASI SALAH SATU GUGUS ALKIL  
SENYAWA SITRININ SECARA KOMPUTASI**

**SKRIPSI**

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi



**YONI AGAM PUTRATAMA  
31118125**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA  
OKTOBER 2022**

## ABSTRAK

### ANALISIS SIFAT FARMAKOKINETIK DAN TOKSISITAS PADA MODIFIKASI SALAH SATU GUGUS ALKIL SENYAWA SITRININ SECARA KOMPUTASI

**Yoni Agam Putratama**

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

#### Abstrak

Sitrinin merupakan salah satu metabolit sekunder yang dihasilkan oleh kapang *Monascus purpureus*, merupakan mikotoksin yang mengkontaminasi berbagai bahan makanan yang memiliki sifat toksik. Penelitian ini bertujuan untuk memodifikasi sifat farmakokinetik dan toksisitas agar lebih baik. Digunakan struktur Sitrinin yang di unduh dari *PubChem* dan digambar menggunakan *Marvin sketch*. Metode yang digunakan merupakan modifikasi dengan memasukan semua kemungkinan skema *Topliss*, didapat delapan belas senyawa hasil modifikasi. Ke delapan belas senyawa menunjukan hasil yang baik menggunakan parameter *Lipinski's Rule of Five*, Hasil pengujian farmakokinetik dan toksisitas menggunakan *pkCSM* dari ke delapan belas senyawa dianalisis dengan membandingkan dengan sitrinin didapatkan senyawa terbaik sitrinin pada no. (16).

**Kata Kunci:** Sitrinin, Topliss, Modifikasi, Komputasi.

#### Abstract

Citrinin is one of the secondary metabolites produced by the fungus *Monascus purpureus*, which is a mycotoxin that contaminates various food ingredients that have toxic properties. This study aims to determine the modification of pharmacokinetic properties and toxicity for the better. The citrinine structure downloaded from *PubChem* was used and drawn using *Marvin sketch*. The method used is a modification by including all possible *Topliss* schemes, obtained eighteen modified compounds. the eighteen compounds showed good results using *Lipinski's Rule of Five* parameters, the results of pharmacokinetic and toxicity tests using *pkCSM* from the eighteen compounds were analyzed by comparing with citrinine, the best compound was citrinine at no. (16).

**Keywords:** Citrinin, Topliss, Modification, Computation.