

**ANALISIS AKTIVITAS ANTIOKSIDAN, SITOTOKSIK DAN DOCKING  
MOLEKULER SENYAWA ANTOSIANIN (DELPHINIDIN, SIANIDIN  
DAN PETUNIDIN) MENGGUNAKAN METODE DFT**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

Oleh

**RESIN PUTRA TEJA KUSUMA**

**NIM : 1810412072**



**Pembimbing I : Imelda, M. Si**

**Pembimbing II : Dr. Suryati, M. Si**

**PROGRAM SARJANA  
JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS ANDALAS  
PADANG  
2022**

**ANALISIS AKTIVITAS ANTIOKSIDAN, SITOTOKSIK DAN DOCKING  
MOLEKULER SENYAWA ANTOSIANIN (DELPHINIDIN, SIANIDIN  
DAN PETUNIDIN) MENGGUNAKAN METODE DFT**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**Oleh**

**RESIN PUTRA TEJA KUSUMA**

**NIM : 1810412072**



Skripsi diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Andalas

**PROGRAM SARJANA  
JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS ANDALAS  
PADANG  
2022**

## INTISARI

### ANALISIS AKTIVITAS ANTIOKSIDAN, SITOTOKSIK DAN DOCKING MOLEKULER SENYAWA ANTOSIANIN (DELPHINIDIN, SIANIDIN DAN PETUNIDIN) MENGGUNAKAN METODE DFT

Oleh:

Resin Putra Teja Kusuma (BP: 1810412072)  
Imelda, M.Si; Dr. Suryati, M. Si

Penelitian mengenai analisis teoritik aktivitas antioksidan dan sitotoksik senyawa turunan antosianin telah dilakukan menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT)/B3LYP/6-31G menggunakan program Gaussian 16 W. Kereaktifan senyawa turunan antosianin dapat diurutkan sebagai berikut: petunidin > delphinidin > sianidin. Berdasarkan parameter kereaktifannya, senyawa petunidin murni lebih baik dibandingkan 3-petunidin glikosida. Berdasarkan mekanisme reaksi antioksidan, mekanisme pemutusan ikatan OH yang menghasilkan H• dan ArO• lebih cocok dengan mekanisme *Sequential Proton Loss Electron Transfer* (SPLET) karena dihasilkan energi total *Proton Afinity* (PA) + *Electron Transfer Energy* (ETE) yang lebih kecil. Analisis pKa senyawa pelargonidin, malvidin, dan peonidin menggunakan *Marvin Sketch 19.25* menunjukkan bahwa pKa senyawa sianidin, delphinidin dan petunidin mendekati pKa darah sehingga dapat dinyatakan larut dalam darah. Penentuan toksisitas senyawa turunan antosianin dengan program *OSIRIS Property Explorer* menunjukkan bahwa senyawa turunan antosianin memenuhi aturan Lipinsky sebagai kandidat obat, tidak bersifat tumorigenik, tidak menyebabkan iritasi dan tidak menyebabkan mutasi gen serta memiliki kemiripan skor obat dengan obat yang ada sebesar 0.44. Sesuai dengan persamaan Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) terpilih didapatkan nilai *Inhibition Concentration 50%* (IC<sub>50</sub>) teoritik sama dengan eksperimen. Berdasarkan analisis *docking* molekuler menggunakan program MOE pada senyawa turunan antosianin secara keseluruhan molekul petunidin dan delphinidin memiliki interaksi yang lebih banyak dengan protein, sehingga lebih potensial sebagai kandidat obat dengan energi docking terbesar -5,9044 kkal/mol.

**Kata Kunci:** Antosianin, DFT, Antioksidan, Toksisitas, *Docking* molekular

## ABSTRACT

### ANALYSIS OF ANTIOXIDANT, CYTOTOXIC, AND MOLECULAR DOCKING ACTIVITIES OF ANTHOCYANIN COMPOUNDS (DELPHINIDIN, CYANIDINE AND PETUNIDIN) USING DFT METHOD

by:

**Resin Putra Teja Kusuma (BP: 1810412072)**

**Imelda, M.Si; Dr. Suryati, M. Si**

Research on theoretical analysis of antioxidant and cytotoxic activity of anthocyanin-derived compounds has been carried out using the Density Functional Theory (DFT)/B3LYP/6-31G method using the Gaussian 16 W program. The reactivity of anthocyanin-derived compounds can be ordered as follows: petunidin > delphinidin > cyanidin. Based on the reactivity parameter, pure petunidin compounds are better than 3-petunidin glycosides. Based on the antioxidant reaction mechanism, the OH bond breaking mechanism that produces  $H\cdot$  and  $ArO\cdot$  is more suitable with the Sequential Proton Loss Electron Transfer (SPLET) mechanism because it produces a smaller total energy of Proton Affinity (PA) + Electron Transfer Energy (ETE). The pKa analysis of pelargonidin, malvidin, and peonidin compounds using Marvin Sketch 19.25 showed that the pKa of cyanidin, delphinidin and petunidin compounds were close to the blood pKa so that they could be declared soluble in blood. Determination of the toxicity of anthocyanin-derived compounds with the OSIRIS Property Explorer program showed that anthocyanin-derived compounds met Lipinsky's rules as drug candidates, were not tumorigenic, did not cause irritation and did not cause gene mutations, and had a similar drug score with existing drugs of 0.44. In accordance with the equation of the selected Quantitative Structure and Activity (HKSA) equation, the theoretical Inhibition Concentration 50% (IC50) value is the same as the experimental one. Based on molecular docking analysis using the MOE program on anthocyanin-derived compounds, overall petunidin and delphinidin molecules have more interactions with proteins, so they are more potential as drug candidates with the largest docking energy of -5.9044 kcal/mol.

**Keywords:** Anthocyanin, DFT, Antioxidant, Toxicity, Molecular docking