

ABSTRAK

Mempelajari Pembentukan Kompleks Antara Tautomer Sitosin dengan Senyawa Metabolit Aktif Glisitein Menggunakan Metode Semiempiris (AM1)

Oleh:

Syafwan Frinaldi (BP 1210412022)

Emdeniz, MS*, Imelda, M.Si*

***Pembimbing**

Telah dilakukan analisis pembentukan kompleks antara senyawa metabolit aktif dari flavonoid glisitein dengan sitosin. Pada penelitian ini dilakukan analisis tautomer sitosin yang paling mungkin terbentuk dan paling stabil serta kompleks yang paling mungkin terbentuk antara senyawa metabolit aktif flavonoid glisitein dengan sitosin. Analisa dilakukan dengan menggunakan metode semiempiris austin model 1 (AM1). Hasilnya menunjukkan bahwa bentuk tautomer sitosin yang paling stabil dan paling mudah terbentuk berdasarkan energi total dan panas pembentukan yang paling rendah, potensial kimia yang relatif paling negatif, dan indeks elektrofilitas relatif paling besar. Interaksi tautomer sitosin dengan senyawa metabolit aktif isoflavan glisitein diol epoksida yang stabil adalah interaksi antara sitosin 4 dengan isoflavan diol epoksida dengan energi total dan panas pembentukan yang paling rendah, dan panjang ikatan yang paling pendek, sedangkan untuk interaksi tautomer sitosin dengan isoflavan diketon yang stabil adalah interaksi isoflavan diketon dengan sitosin 5 yang memiliki energi total dan panas pembentukan yang paling rendah, dan panjang ikatan yang paling pendek dan berdasarkan transfer elektron didapatkan bahwa tautomer sitosin bertindak sebagai donor elektron terhadap isoflavan diol epoksida dan diketon dengan nilai transfer muatan bernilai positif.

Kata kunci: Tautomer Sitosin, Flavonoid, Semiempiris (AM1), Glisitein