

# BAB I. PENDAHULUAN

## 1.1 Latar Belakang

Antioksidan merupakan senyawa yang mampu menghambat reaksi radikal bebas dalam tubuh manusia. Adanya radikal bebas dipercayai sebagai penyebab sejumlah penyakit seperti kardiovaskuler, neurodegeneratif, dan kanker jenis tertentu. Aktivitas antioksidan terdiri dari beberapa mekanisme diantaranya mencegah reaksi berantai, mencegah pembentukan peroksida, mencegah pengambilan atom hidrogen, mereduksi, dan menangkap radikal. Pada umumnya antioksidan mengandung struktur inti sama yang mengandung cincin benzen tidak jenuh disertai gugusan hidroksi atau gugus amino [1].

Flavonoid merupakan salah satu senyawa antioksidan dan termasuk dalam golongan senyawa fenolik dengan struktur kimia C<sub>6</sub>-C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub> [2]. Flavonoid memiliki cincin benzen yang bebas. Adanya cincin bebas benzen dalam metabolisme tubuh yang dibantu oleh enzim P-450, enzim epoksida hidrase dan glutathion-S-transferase memungkinkan terbentuknya diol epoksida dan diketon yang merupakan metabolit aktif [3]. Senyawa metabolit berupa diketon dan diol epoksida flavonoid cenderung berikatan dengan basa nitrogen DNA maupun dalam bentuk tautomernya. Jika metabolit aktif berikatan dengan basa nitrogen DNA akan membentuk senyawa kompleks yang bersifat karsinogen. Senyawa karsinogen ini dapat menyebabkan kerusakan pada struktur DNA sehingga memungkinkan terjadi mutasi gen [3,4]. Pada penelitian yang telah dilakukan sebelumnya tentang interaksi guanin dengan flavonoid genistein dan interaksi metabolit hidrokarban dengan asam nukleat, sehingga perlu dilakukan penelitian lanjutan yang akan membahas tentang interaksi sitosin dan tautomernya dengan flavonoid glisitein. Untuk melihat interaksi yang terjadi antara basa nitrogen DNA dengan metabolit aktif dilakukan dengan pendekatan pemodelan menggunakan konsep kimia komputasi.

Pada penelitian ini dilakukan studi terhadap pembentukan kompleks antara tautomer basa nitrogen sitosin dan tautomernya dengan senyawa metabolit aktif isofavon diol epoksida dan isoflavon diketon dengan menggunakan metode semiempiris AM1. Dengan menggunakan metode ini dapat diketahui bentuk yang stabil dari tautomer sitosin yang berinteraksi dengan isoflavon tersubstitusi diol epoksida dan diketon. Analisis yang dilakukan ditinjau dari energi total, panas pembentukan( $\Delta H_f$ ), energi hidrasi, potensial kimia ( $\mu$ ), kekerasan kimia ( $\eta$ ), panjang ikatan, dan energi HOMO dan LUMO untuk mengetahui tingkat kestabilan dalam tubuh.

### **1.2 Rumusan masalah**

Berdasarkan latar belakang, Perlu dilakukan penelitian untuk mengetahui tautomer dari basa nitrogen DNA (sitosin) yang berinteraksi dengan metabolit aktif isoflavon tersubstitusi diol epoksida dan diketon yang memungkinkan membentuk senyawa karsinogen.

### **1.3 Tujuan penelitian**

Tujuan dilakukannya penelitian ini adalah:

1. Menentukan bentuk stabil tautomer sitosin.
2. Mengetahui bentuk stabil tautomer sitosin yang berinteraksi dengan senyawa metabolit aktif dari flavonoid glisitein.
3. Membandingkan antara diol epoksida dan diketon yang memiliki ikatan paling kuat dan stabil pada pembentukan senyawa kompleks dengan tautomer sitosin.

### **1.4 Manfaat penelitian**

1. Dapat mengetahui bentuk stabil tautomer sitosin.
2. Dapat mengetahui bentuk stabil tautomer sitosin yang berinteraksi dengan senyawa metabolit aktif dari flavonoid glisitein.
3. Dapat membandingkan antara diol epoksida dan diketon yang memiliki ikatan paling kuat dan stabil pada pembentukan senyawa kompleks dengan tautomer sitosin.

