

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Flavonoid adalah suatu kelompok senyawa fenolik yang terbesar ditemukan di alam. Senyawa-senyawa ini merupakan zat warna merah, ungu, dan biru, dan sebagian zat warna kuning yang ditemukan dalam tumbuh-tumbuhan. Flavonoid mempunyai kerangka dasar karbon yang terdiri dari 15 atom karbon, dimana dua cincin benzene (C6) terikat pada suatu rantai propan (C3) sehingga membentuk suatu susunan C6-C3-C6¹.

Flavonoid mempunyai satu cincin yang memungkinkan terbentuknya metabolit diketon dan diolepoksida. Kedua metabolit ini merupakan metabolit aktif yang cenderung berikatan dengan DNA di dalam tubuh. Senyawa metabolit flavonoid yang telah berikatan dengan DNA, diol epoksida dan diketon akan bersifat karsinogen di dalam tubuh¹.

Karsinogen merupakan sifat senyawa yang dapat menyebabkan kanker. Interaksi senyawa karsinogen ini dengan asam deoksiribonukleat (DNA) dalam sel-sel tubuh akan menyebabkan terganggunya proses-proses biologis. Proses ini merupakan proses karsinogenesis yaitu proses terjadinya kanker yang diawali dengan adanya kerusakan DNA atau mutasi pada gen-gen pengatur pertumbuhan. Mutasi tersebut umumnya disebabkan karena adanya paparan senyawa karsinogen².

Pembentukan *adduct* yang bersifat karsinogen antara genistein dengan salah satu basa DNA yaitu adenin akan dipengaruhi oleh bentuk tautomer dan kestabilan tautomer. Salah satu senyawa genistein adalah isoflavon dengan demikian kita perlu mengetahui tautomer mana yang paling memungkinkan menghasilkan *adduct* yang akan menyebabkan terbentuknya karsinogen didalam tubuh².

Untuk dapat mengetahui bentuk struktur yang paling mungkin dalam menghasilkan *adduct* dari tautomer adenin di dalam tubuh perlu dikembangkan desain molekul baik dengan cara sintesis langsung maupun dicoba dengan pendekatan pemodelan menggunakan konsep-konsep kimia komputasi. Dengan menggunakan metode kimia komputasi

memungkinkan kita untuk melakukan penentuan struktur dan sifat suatu kimia dengan waktu yang cepat dan biaya yang lebih efisien³.

Pada penelitian ini menggunakan metode semiempiris AM1. Dengan digunakannya metode ini maka dapat ditentukan nilai energi total, HOMO, LUMO, dan panjang ikatan atau disesuaikan dengan kebutuhan peneliti yang terjadi pada reaksi antara genistein dengan basa DNA (adenin) yang menghasilkan *adduct* diketon dan diol epoksida yang bersifat karsinogen didalam tubuh⁴.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang, penelitian ini dilakukan untuk mengetahui tautomer dari basa nukleat (adenin) yang paling memungkinkan berikatan atau bereaksi dengan metabolit aktif. Senyawa genistein dan adenin bila bereaksi didalam tubuh memungkinkan bereaksi membentuk *adduct* genistein diketon dan diol epoksida dimana kedua metabolit aktif ini akan bersifat karsinogen. Untuk itu perlu diketahui energi total pembentukan, HOMO dan LUMO untuk tingkat kestabilannya didalam tubuh.

1.3 Tujuan Penelitian

1. Menentukan tautomer yang paling stabil dan mudah terbentuk
2. Menentukan interaksi yang paling mungkin terjadi antara genistein isoflavon diol epoksida dan diketon dengan adenin

1.4 Manfaat Penelitian

1. Dapat mengetahui bentuk tautomer adenin yang paling mungkin yang berikatan dengan genistein
2. Hasil penelitian ini dapat membantu peneliti penyakit yang bersifat karsinogen mengetahui bentuk yang stabil antara genistein dengan adenin yang berpotensi menimbulkan karsinogen didalam tubuh.

