

**MEMPELAJARI INTERAKSI ANTARA TAUTOMER ADENIN DENGAN
SENYAWA METABOLIT AKTIF GENISTEIN MENGGUNAKAN
METODE SEMIEMPIRIS (AM1)**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

OLEH



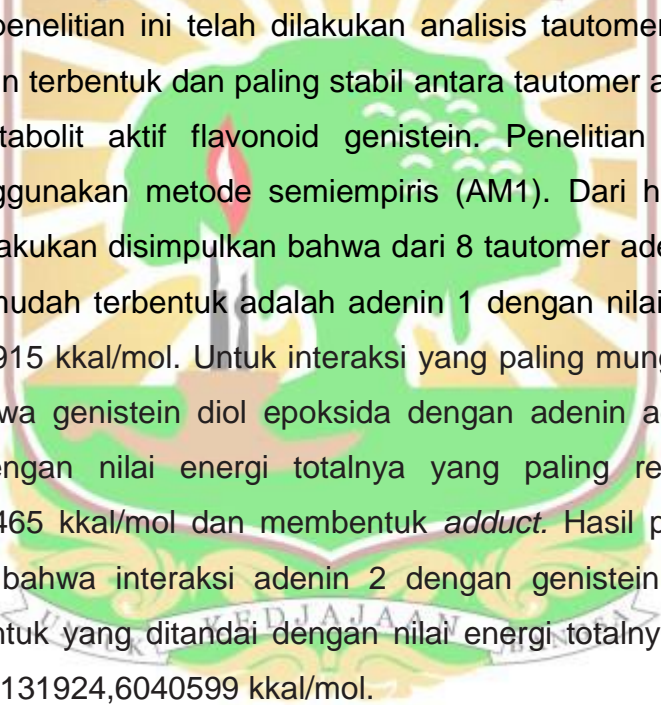
**JURUSAN S1 KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2017**

INTISARI

MEMPELAJARI INTERAKSI ANTARA TAUTOMER ADENIN DENGAN SENYAWA METABOLIT AKTIF GENISTEIN MENGGUNAKAN METODE SEMIEMPIRIS (AM1)

Oleh:

Yezi Permata Sari (BP 1210411007)
Emdeniz, MS, Imelda, M.Si

The logo of Universitas Andalas is a shield-shaped emblem. At the top, a banner contains the text 'UNIVERSITAS ANDALAS'. The central part of the shield features a green tree with a red flame-like shape at its base. Below the tree, there is a white banner with the text 'WISATA BUDAJAAN'. The shield is surrounded by a decorative border.

Pada penelitian ini telah dilakukan analisis tautomer adenin yang paling mungkin terbentuk dan paling stabil antara tautomer adenin dengan senyawa metabolit aktif flavonoid genistein. Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan metode semiempiris (AM1). Dari hasil penelitian yang telah dilakukan disimpulkan bahwa dari 8 tautomer adenin, tautomer yang paling mudah terbentuk adalah adenin 1 dengan nilai energi total -40176,70880915 kkal/mol. Untuk interaksi yang paling mungkin terbentuk antara senyawa genistein diol epoksida dengan adenin adalah dengan adenin 2 dengan nilai energi totalnya yang paling rendah yaitu -140599,6493465 kkal/mol dan membentuk *adduct*. Hasil penelitian juga menjelaskan bahwa interaksi adenin 2 dengan genistein diketon juga mudah terbentuk yang ditandai dengan nilai energi totalnya yang paling rendah yaitu -131924,6040599 kkal/mol.

Kata kunci: Tautomer adenin, Semiempiris (AM1), Genistein

ABSTRACT

A STUDY OF INTERACTION BETWEEN ADENINE TAUTOMERS WITH GENISTEIN ACTIVE METABOLITE COMPOUND USING SEMIEMPIRICAL METHOD (AM1)

By:

Yezi Permata Sari (BP 1210411007)
Emdeniz, MS, Imelda, M.Si

In this study we analyzed the adenine tautomers most likely formed and most stable among adenine tautomers with genistein active metabolite compound. This research was studied by semiempirical method (AM1). From the research was studied concluded that from 8 adenine tautomers, tautomers easiest form is adenine 1 with a total energy value $-40,176.70880915$ kcal / mol. For most interactions may be formed between the genistein diolepoxide compound with adenine is with adenine 2 with a total value of lowest energy is $-140,599.6493465$ kcal / mol and form *adduct*. The results also explain that the interaction of adenine 2 with diketone genistein also easily formed which is characterized by its total energy value of the lowest is $-131,924.6040599$ kcal / mol.

Keyword: Adenine, Tautomers, Semiempirical (AM1), Genistein

