

I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Flavonoid merupakan senyawa fenolik yang banyak terdapat pada jaringan tanaman. Senyawa ini salah satu kelompok senyawa metabolit sekunder yang paling banyak ditemukan di dalam jaringan tanaman. Flavonoid terdiri atas antosianidin, flavonol, flavon, flavanol, flavanon, dan isofalvon¹. Salah satu senyawa kelompok flavonol adalah kaempferol. Kaempferol adalah produk tumbuhan alami yang banyak terdapat pada sayuran, buah-buahan, anggur, kopi, obat herbal dan lain-lainnya². Penelitian sebelumnya telah menunjukkan bahwa senyawa ini dapat mencegah dan mengobati kanker³, arteriosklerosis, gangguan kardiovaskular, dan juga berfungsi sebagai antioksidan dan anti-inflamasi⁴. Beberapa tahun terakhir, penelitian menunjukkan bahwa kaempferol dapat membantu pengobatan kanker, penyakit jantung, gangguan neuron dan kolesterol⁵⁻⁶.

Aktivitas antioksidan dipengaruhi oleh mudah atau sulitnya membentuk radikal dan kestabilan radikal yang terbentuk dari gugus O-H polifenol. Radikal bebas yang paling penting terbentuk selama reaksi oksidasi diantaranya radikal hidroksil (OH[•]), alkoksil (RO[•]), dan peroksil (ROO[•])⁷. Baik atau buruknya aktivitas antioksidan sangat ditentukan oleh mudah atau sulit terbentuknya radikal-radikal ini. Menurut Meysam Najafi adanya substituen pada posisi orto dan meta dari senyawa turunan indolin-2-on, akan mempengaruhi nilai *Bond Dissociation Enthalpy* (BDE), *Proton Affinity* (PA) dari senyawa indolin-2-on⁸. Menurut Meysam Najafi penambahan substituen *Electron Donating Group* (EDG) dan *Electron Withdrawing Group* (EWG) pada cincin aromatik A menstabilkan elektron dan melemahkan radikal, karena meningkatkan O-H BDE. Namun kelompok elektron pada posisi orto dan meta menyebabkan penurunan O-H BDE dari senyawa daidzein⁹. Menurut Tahir untuk dapat menemukan senyawa antioksidan baru perlu dikembangkan desain molekul baik dengan cara sintesis langsung maupun percobaan dengan pendekatan pemodelan menggunakan konsep-konsep kimia komputasi¹⁰. Kimia komputasi adalah salah satu cabang ilmu kimia yang berkembang dengan pesat seiring dengan perkembangan sains komputasi, khususnya untuk pemecahan masalah perhitungan molekuler yang berbasis kimia kuantum. Salah satu aplikasi kimia komputasi dalam bidang kimia *medicinal* adalah kajian analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA). Metode yang berdasarkan hubungan tersebut, aktivitas teoritik senyawa baru dapat diprediksi sehingga fokus riset dapat dipersempit, biaya dan waktu dapat lebih efisien¹¹.

Penelitian kimia komputasi ini digunakan untuk memprediksi aktivitas dari berbagai senyawa kaempferol. Metode kimia komputasi dapat menganalisis mekanisme reaksi dan memprediksi reaktivitas dalam kimia sintetik. Metode semiempiris telah sukses diterapkan untuk meneliti pengaruh substituen pada kelompok senyawa kaempferol yang tersubstitusi¹². Perhitungan dengan metode semiempiris *Austin Model 1* (AM1) akan dilakukan untuk menghitung sifat molekuler dari senyawa kaempferol dasar, kaempferol radikal, kaempferol tersubstitusi gugus penarik elektron dan gugus pendonor elektron digunakan metode semiempiris AM1. Mohammad Momen Heravi menyatakan terjadi pengurangan O-H BDE untuk kaempferol tersubstitusi dalam fase gas¹³. Penelitian ini akan mencari metode penentuan aktivitas antioksidan flavonoid secara teoritis dan dilakukan juga perhitungan aktivitas antioksidan dari senyawa kaempferol tersubstitusi oleh gugus penarik elektron atau *Electron Withdrawing Groups* (Cl, F, CN, NO dan NO₂) dan gugus pendonor elektron atau *Electron Donating Groups* (CH₃, NH₂, NHCH₃, N(CH₃)₂, dan OCH₃).

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang perlu diteliti metoda penentuan aktivitas antioksidan suatu senyawa flavonoid secara teoritis melalui pengukuran *Bond Dissociation Electron* (BDE), *Single Electron Transfer-Pronton Transfer* (SET-PT), *Proton Affinity* (PA) dan *Electron Transfer Entalpi* (ETE) senyawa tersebut. Disamping itu perlu dilakukan penelitian terhadap pengaruh substituen EWG dan EDG pada posisi tertentu pada flavonoid terhadap aktivitas antioksidan secara teoritis.

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan:

1. Menentukan nilai BDE rata-rata, SET-PT rata-rata, PA rata-rata dan ETE rata-rata dari senyawa flavonoid (kaempferol, galangin, quersetin, robinetin, fisetin, 3-hidroksi flavon dan morin).
2. Mencari metoda teoritis sederhana aktivitas antioksidan berdasarkan nilai BDE rata-rata, SET-PT rata-rata, PA rata-rata dan ETE rata-rata.
3. Menentukan pengaruh adanya substituen penarik elektron dan pendonor elektron pada kaempferol terhadap aktivitas antioksidannya.

1.4 Manfaat Penelitian

Adapun manfaat dilakukan penelitian ini, yaitu:

1. Dapat mengetahui metoda teoritis sederhana aktivitas antioksidan berdasarkan nilai BDE rata-rata, SET-PT rata-rata, PA rata-rata dan ETE rata-rata.
2. Dapat memprediksi nilai aktivitas antioksidan secara teoritis dari senyawa flavonoid.
3. Dapat menentukan pengaruh adanya substituen penarik elektron dan pendonor elektron pada kaempferol terhadap aktivitas antioksidannya.

