

I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Perkembangan zaman dewasa ini telah membuat sebagian besar masyarakat mengalami perubahan pola hidup seperti hal pola makan sebagian besar masyarakat lebih memilih makanan cepat saji. Pola makan yang seperti ini, dapat menyebabkan munculnya beragam penyakit, seperti kanker, diabetes mellitus, *aterosklerosis*, katarak, dan penyakit jantung koroner¹. Penyakit ini biasanya disebabkan oleh pola makan yang tidak sesuai dengan kebutuhan yang diperlukan oleh tubuh, sehingga menyebabkan kondisi tubuh mudah terserang penyakit. Antioksidan sangat berperan penting bagi tubuh karena dapat memperlambat atau mencegah terjadinya kerusakan sel diakibatkan oleh radikal bebas dengan jalan meredam aktivitas radikal bebas atau memutus rantai reaksi oksidasi yang disebabkan oleh radikal bebas².

Radikal bebas adalah molekul yang mengandung satu atau lebih elektron tidak berpasangan pada orbital terluarnya. Radikal bebas sangat reaktif dan tidak stabil, sehingga untuk mencapai kestabilan radikal bebas akan bereaksi dengan atom atau molekul di sekitarnya untuk memperoleh pasangan elektron. Untuk meredam aktivitas radikal bebas diperlukan antioksidan³. Aktivitas antioksidan dipengaruhi oleh mudah atau tidaknya terbentuknya radikal yang berasal dari gugus OH dari senyawa fenolik⁴. Senyawa antioksidan banyak terkandung didalam tumbuh-tumbuhan dan salah satunya adalah flavonoid. Flavonoid dalam tubuh manusia berfungsi sebagai antioksidan yang dapat menghambat pertumbuhan radikal bebas. Senyawa ini merupakan salah satu kelompok metabolit sekunder yang paling banyak ditemukan di dalam jaringan tanaman. Flavonoid merupakan senyawa fenolik yang dimiliki oleh sebagian besar tumbuhan hijau dan biasanya terkonsentrasinya pada biji, buah, kulit buah, kulit kayu, daun, dan bunga⁵.

Salah satu senyawa flavonoid yang memiliki antioksidan tinggi yaitu morin. Morin (*3,5,7,2',4'-pentahydroxyflavone*) adalah turunan flavon berupa kristal kuning yang bersifat asam awalnya diekstrak dari kayu tua *fustic* (*Chlorophora tinctoria*), terdistribusi secara luas pada family moraceae, almond, coklat manis serta rempah-rempah dan buah-buahan lainnya yang digunakan sebagai obat-obatan herbal⁶. Morin memiliki sifat sebagai oksidasi inhibitor⁷, antiinflamasi⁸, antikanker⁹, menghambat proses sintesis ATP *Escherichia coli*¹⁰, *pro-efektive* pada kerusakan DNA yang disebabkan oleh radikal bebas¹¹, dan mencegah terjadinya oksidasi *low-density* lipoprotein¹². Aktivitas antioksidan dapat dihitung secara eksperimen dan

teoritis. Secara eksperimen dengan menggunakan metoda CUPRAC (*cupric ion reducing antioxidant capacity*), DPPH (*2,2-difenil-1-pikrilhidrazil*), dan FRAP (*ferric reducing antioxidant power*)¹³. Sedangkan secara teoritis dapat dilakukan berdasarkan pendekatan kimia komputasi. Salah satu aplikasi kimia komputasi yang dapat diterapkan adalah kajian *Quantitative Structure-Activity Relationship* (QSAR) atau hubungan kuantitatif struktur aktivitas. Kajian ini mempelajari korelasi secara kuantitatif antara struktur molekul dan nilai aktivitas biologis yang terukur secara eksperimen. Kajian QSAR menjabarkan suatu model persamaan yang menghubungkan ketergantungan harga aktivitas suatu senyawa secara eksperimen dengan struktur molekul. Metoda QSAR telah berhasil digunakan oleh Tahir untuk senyawa turunan flavon/falvonol, metoda tersebut berhasil baik untuk memilih variable bebas yang berpengaruh dan hasilnya dapat digunakan untuk mendesain senyawa turunan baru. Desain senyawa baru ini umumnya dilakukan dengan cara pengamatan terhadap derivat senyawa tertentu yang telah diketahui aktivitas biologisnya, misalnya dengan melakukan substitusi terhadap gugus yang ada pada senyawa tersebut.

Pada penelitian ini dihitung nilai *Bond Dissociation Entalphi* (BDE) rata-rata, *Single Electron followed by Proton Transfer* (SET-PT) rata-rata, *Proton Affinities* (PA) rata-rata dan *Electron Transfer Entalpy* (ETE) rata-rata senyawa flavonoid (kaempferol, galagin, quercetin, robinetin, fisetin, 3-hydroxyflavon, dan morin). Selanjutnya diteliti cara penentuan aktivitas antioksidan flavonoid ini dengan menggunakan parameter di atas. Persamaan regresi linear yang di dapat, digunakan untuk menghitung aktivitas antioksidan morin dan morin tersubstitusi gugus penarik atau *Electron Withdrawing Group* (EWG) yaitu NO₂, NO, CN, F, Cl dan penolak elektron atau *Electron Donating Group* (EDG) yaitu CH₃, NH₂, OCH₃, NHCH₃, N(CH₃)₂.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas dilakukan penelitian untuk menentukan metoda penentuan aktivitas antioksidan senyawa flavonoid secara teoritis melalui pengukuran BDE, SET-PT, PA dan ETE. Disamping itu perlu dilakukan penelitian terhadap pengaruh *Electron Withdrawing Group* (EWG) dan *electron Donating Group* (EDG) pada posisi tertentu.

1.3 Tujuan Penelitian

1. Menentukan nilai BDE, SET-PT, PA dan ETE senyawa flavonoid (kaempferol, galagin, quercetin, robinetin, fisetin, 3-hydroxyflavon, morin) dan morin tersubstitusi.
2. Mencari metoda teoritis sederhana untuk menghitung nilai aktivitas antioksidan berdasarkan nilai BDE, SET-PT, PA dan ETE.
3. Menentukan pengaruh adanya substituen penarik dan penolak elektron pada morin terhadap aktivitas antioksidannya.

1.4 Manfaat Penelitian

1. Dapat memprediksi aktivitas antioksidan senyawa flavonoid secara teoritis.
2. Dapat memperkirakan pengaruh penambahan substituen penarik dan substituen pendorong elektron dari senyawa flavonoid secara teoritis.
3. Dapat mendesain molekul dengan aktivitas antioksidan lebih baik sesuai dengan yang dibutuhkan.

