

I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Flavonoid merupakan salah satu kelompok senyawa metabolit sekunder yang paling banyak ditemukan didalam jaringan tanaman. Senyawa fenolik ini yang dimiliki oleh sebagian besar tumbuhan hijau dan biasanya terkonsentrasinya pada biji, buah, kulit buah, kulit kayu, daun, dan bunga¹. Flavonoid terdiri atas flavon, flavonol, isoflavon, flavanon, antosianin. Flavonoid golongan flavonol diantaranya kaempferol, quersetin, robinetin, galangin, fisetin, 3-hidroxi flavon, dan morin. Fisetin (3,7,3',4'-tetrahydroxyflavone). Fisetin banyak terkandung didalam buah-buahan dan sayur-sayuran seperti strawberry, apel, anggur, mentimun, kesemek, dan bawang. Masyarakat Jepang selalu mengkonsumsi makanan yang mengandung fisetin sebanyak 0,4 mg per hari untuk program diet. Pada penelitian sebelumnya fisetin juga dapat digunakan sebagai penghambat pertumbuhan sel kanker didalam tubuh².

Oksidasi menyebabkan kerusakan *irreversible* pada sistem biologis. Radikal bebas yang paling penting terbentuk selama reaksi oksidasi diantaranya radikal hidroksil (HO^\bullet), alkoksil (RO^\bullet) dan peroksil (ROO^\bullet). Antioksidan adalah senyawa kimia yang dapat menghambat radikal bebas selama proses oksidasi. Hal tersebut dapat diketahui bahwa senyawa fenolik bertindak sebagai antioksidan primer. Aktivitas antioksidan dipengaruhi oleh mudah atau sulitnya membentuk radikal dan kestabilan radikal yang terbentuk dari gugus O-H polifenol³.

Kimia komputasi adalah salah satu cabang ilmu kimia yang berkembang dengan pesat seiring dengan perkembangan sains komputasi khususnya untuk pemecahan masalah perhitungan *molecular* yang berbasis kimia kuantum. Salah satu aplikasi kimia komputasi dalam bidang kimia medisinal adalah kajian analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA). Kajian HKSA menerapkan metode khemometri terhadap satu seri senyawa dengan struktur induk tertentu menggunakan data hasil perhitungan komputasi yang dikaitkan dengan suatu data aktivitas biologis⁴. Dengan metode analisis HKSA, senyawa yang akan disintesis dapat didesain terlebih dahulu berdasarkan hubungan antara struktur dan aktivitas senyawa tersebut. Dengan menggunakan hubungan tersebut, aktivitas teoritik senyawa baru dapat diprediksi sehingga fokus riset dapat dipersempit, biaya, dan waktu dapat lebih efisien. Metode kimia komputasi telah diperkenalkan untuk menganalisis mekanisme reaksi dan memprediksi reaktivitas dalam kimia sintetik. Oleh karena itu, kimia komputasi digunakan untuk memprediksi reaktivitas dari

berbagai senyawa flavonoid. Pada penelitian ini akan dicari metoda sederhana secara teoritis untuk penentuan aktivitas antioksidan dari flavonoid, terutama fisetin tersubstitusi gugus penolak elektron (*Electron Donating Group*) dan gugus penarik elektron (*Electron Withdrawing Group*). Metoda tersebut merupakan kajian hubungan *Quantitative Structure-Activity Relationship* (QSAR) yang berdasarkan nilai energi rata-rata dari senyawa fisetin dan fisetin tersubstitusi dari nilai BDE, SET-PT, PA, dan ETE yang diperoleh dari hasil optimasi didapatkan $\Delta H \text{ ArOH}$, $\Delta H \text{ ArO}^\bullet$, $\Delta H \text{ ArO}^-$ untuk masing-masing posisi OH pada fisetin.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang, perlu diteliti metoda penentuan aktivitas antioksidan suatu senyawa flavonoid secara teoritis berdasarkan nilai BDE, SET-PT, PA dan ETE senyawa tersebut. Disamping itu perlu dilakukan penelitian terhadap pengaruh substituent gugus penarik elektron dan gugus pendonor elektron pada posisi tertentu pada flavonoid terhadap aktivitas antioksidan secara teoritis.

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan:

1. Menentukan apakah nilai BDE rata-rata, SET-PT rata-rata, PA rata-rata, dan ETE rata-rata pada senyawa flavonoid (kaempferol, robinetin, galangin, quersetin, fisetin, morin, 3-hidroxi flavon) dapat ditentukan dengan metode AM1.
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 penolak elektron pada fisetin 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 memperkirakan nilai aktivitas antioksidan secara teoritis dari senyawa flavonoid.
3. Dapat memperkirakan pengaruh penambahan substituen penarik elektron dan penolak elektron dari senyawa flavonoid terhadap aktivitas antioksidan secara teoritis.

