

**STUDI KOMPUTASI SIFAT ANTIOKSIDAN, TOKSISITAS, SKOR OBAT DAN  
DOCKING MOLEKULER DARI KATEKIN DAN KATEKIN TERMODIFIKASI**

**TESIS**

**Oleh:**

**MARTANIA ANGGRIANY, S.Si**

**NIM. 2020412010**



**Pembimbing I : Prof. Dr. Adlis Santoni**

**Pembimbing II : Prof. Dr. Emriadi**

**PROGRAM STUDI MAGISTER KIMIA  
DEPARTEMEN KIMIA FAKULTAS MIPA**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**PADANG**

**2024**

# STUDI KOMPUTASI SIFAT ANTIOKSIDAN, TOKSISITAS SKOR OBAT DAN DOCKING MOLEKULER DARI KATEKIN DAN KATEKIN TERMODIFIKASI

Oleh: MARTANIA ANGGRIANY (2020412010)  
(Dibawah bimbingan: Prof. Dr. Adlis Santoni dan Prof. Dr. Emriadi)

## Abstrak

Gangguan kronis seperti kanker dapat disebabkan oleh ketidakseimbangan produksi radikal bebas dengan pertahanan antioksidan dalam tubuh. Potensi senyawa katekin dan 5 katekin termodifikasi sebagai kandidat obat kanker diteliti melalui aktivitas antioksidan, toksisitas, skor obat dan docking molekuler. Pada penelitian ini aktivitas antioksidan dipelajari menggunakan metode DFT (*Density Functional Theory*)/B3LYP/3-31G dalam fase gas. Toksisitas dan skor obat dari senyawa katekin dan katekin termodifikasi dianalisis menggunakan perangkat lunak OSIRIS *Property Explorer*. Analisis interaksi senyawa katekin dan katekin termodifikasi dengan sel protein kanker menggunakan perangkat lunak MOE (*Molecular Operating Environment*). Hasil penelitian menunjukkan bahwa mekanisme reaksi antioksidan untuk pemutusan OH dengan menghasilkan H• dan ArO• lebih mudah terjadi pada mekanisme *Single Electron Transfer – Proton Transfer* (SET –PT), dikarenakan energi total yang dihasilkan oleh IP (*Ionization Potential*) + PDE (*Proton Dissociation Enthalpy*) yang lebih kecil. Senyawa katekin dan senyawa 1, 2, 3, 4 dan 5 tidak bersifat toksik (tidak ada resiko) untuk mutasi gen, tumor, iritasi dan reproduksi. Senyawa katekin dan katekin termodifikasi (1-5) memiliki nilai skor obat (0,453-0,871). Senyawa katekin dan 5 katekin termodifikasi diperkirakan dapat digunakan sebagai antioksidan potensial tanpa efek samping pada sistem biologis. Dari studi farmakofor didapatkan bahwa senyawa yang memiliki interaksi terbaik dengan reseptor 5KYK yaitu senyawa 1.

**Kata Kunci:** Katekin, Katekin termodifikasi, DFT, Antioksidan, Toksisitas, *Molekular Docking*.

# COMPUTATIONAL STUDY OF ANTIOXIDANT PROPERTIES, DRUG TOXICITY SCORE AND MOLECULAR DOCKING OF CATECHINS AND MODIFIED CATECHINS COMPOUND

By: MARTANIA ANGGRIANY (2020412010)

(Under the guidance of: Prof. Dr. Adlis Santoni and Prof. Dr. Emriadi)

## Abstrack

Chronic disorders such as cancer can be caused by an imbalance in free radical production with the body's antioxidant defenses. Through antioxidant activity, toxicity, drug score and molecular docking. In this research, antioxidant activity was studied using the DFT (Density Functional Theory)/B3LYP/3-31G method in the gas phase. The toxicity and drug scores of catechin and modified catechin compounds were analyzed using OSIRIS Property Explorer software. Analysis of the interaction of catechin and modified catechin compounds with cancer cell proteins using MOE (Molecular Operating Environment) software. The research results show that the antioxidant reaction mechanism for cleavage of OH by producing H• and ArO• occurs more easily in the Single Electron Transfer – Proton Transfer (SET –PT) mechanism, due to the total energy produced by IP (Ionization Potential) + PDE (Proton Dissociation). Enthalphy) which is smaller. Catechin compounds and compounds 1, 2, 3, 4 and 5 are not toxic (no risk) for gene mutations, tumors, irritation and reproduction. Catechin compounds and modified catechins (1-5) have a drug score value of (0.453-0.871). It is estimated that catechin compounds and 5 modified catechins can be used as potential antioxidants without side effects on biological systems. From the pharmacophore study, it was found that the compound that had the best interaction with the 5KYK receptor was compound 1.

Keywords: Catechins, Modified Catechins, DFT, Antioxidants, Toxicity, Molecular Docking