

**STUDI KOMPUTASI SIFAT ANTIOKSIDAN,  
TOKSISITAS DAN SKOR OBAT DARI SENYAWA  
SCOPOLETIN DAN SCOPOLETIN  
TERMODIFIKASI**

**TESIS**

**ANNISA WULANDARI, S.Si**

**NIM. 1720412015**



**UNTUK**

**KEDJAJAAN**

**BANGSA**

**PROGRAM STUDI MAGISTER KIMIA  
JURUSAN KIMIA FAKULTAS MIPA  
UNIVERSITAS ANDALAS**

**PADANG**

**2020**

# STUDI KOMPUTASI SIFAT ANTIOKSIDAN, TOKSISITAS, DAN SKOR OBAT DARI SENYAWA SCOPOLETIN DAN SCOPOLETIN TERMODIFIKASI

Oleh : ANNISA WULANDARI (1720412015)  
(Dibawah bimbingan: Dr. Afrizal dan Prof. Dr. Emriadi)

## Abstrak

Sifat antioksidan, toksisitas dan skor obat dari senyawa scopoletin dan 10 senyawa scopoletin termodifikasi dianalisis secara komputasi. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis sifat antioksidan, toksisitas dan skor obat dari senyawa scopoletin dan scopoletin termodifikasi secara teoritis. Studi komputasi senyawa scopoletin dan scopoletin termodifikasi dianalisis menggunakan metode DFT/B3LYP/6-31G dalam fase gas. Sifat antioksidan dari scopoletin dan scopoletin termodifikasi dianalisis dengan metode BDE (*Bond Dissociation Energy*), SET-PT (*Single Electron Transfer followed by Proton Transfer*), PA (*Proton Affinity*), dan ETE (*Electron Transfer Enthalpy*). Toksisitas dan skor obat dari senyawa scopoletin dan scopoletin termodifikasi dianalisis menggunakan perangkat lunak OSIRIS *Property Explorer*. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa **2** dan **4** memiliki sifat antioksidan paling kuat dengan nilai IC<sub>50</sub> prediksi kecil dari 18,5  $\mu$ M berdasarkan nilai BDE, SET-PT, ETE dan PA yang kecil dari scopoletin dan scopoletin termodifikasi lainnya. Sifat antioksidan scopoletin dan scopoletin termodifikasi dapat dijelaskan dengan mekanisme Transfer Atom Hidrogen (TAH) dengan nilai BDE berkisar antara 69,986 - 90,510 kkal/mol dalam fase gas. Senyawa **1**, **2**, **3**, **4**, **5**, dan **10** tidak bersifat toksik (tidak ada resiko) untuk mutasi gen, tumor, iritasi, dan reproduksi. Senyawa scopoletin bersifat resiko menengah untuk reproduksi. Sedangkan Senyawa **6**, **7**, **8**, dan **9** bersifat resiko tinggi (toksik) untuk reproduksi. Senyawa scopoletin dan scopoletin termodifikasi (**1-10**) memiliki nilai skor obat positif (0,270-0,503) yang menunjukkan bahwa senyawa tersebut memiliki kemiripan obat yang sebanding dengan obat yang ada. Senyawa **1**, **2**, **3**, **4**, **5** dan **10** diperkirakan dapat digunakan sebagai antioksidan potensial tanpa efek samping pada sistem biologis.

**Kata kunci:** Kimia komputasi, scopoletin, scopoletin termodifikasi, antioksidan, toksisitas, skor obat.

# COMPUTATIONAL STUDIES ON ANTIOXIDANT AND TOXICITY PROPERTIES, DRUG SCORES OF SCOPOLETIN AND MODIFIED SCOPOLETIN COMPOUNDS

by: ANNISA WULANDARI (1720412015)  
(Supervised: Dr. Afrizal dan Prof. Dr. Emriadi)

## Abstract

Antioxidant and toxicity properties, drug scores of scopoletin and 10 modified scopoletin compounds were analyzed through computational. This study aims to analyze the antioxidant and toxicity properties, drug scores of theoretically scopoletin and modified scopoletin compounds. Computational studies of scopoletin and modified scopoletin compounds were analyzed using the DFT/B3LYP/6-31G method in the gas phase. The antioxidant properties of scopoletin and modified scopoletin were analyzed using the BDE (Bond Dissociation Energy), SET-PT (Single Electron Transfer followed by Proton Transfer), PA (Proton Affinity), and ETE (Electron Transfer Enthalpy) methods. The toxicity and drug scores of the scopoletin and modified scopoletin compounds were analyzed using OSIRIS Property Explorer software. The results showed that compound **2** and **4** are modified scopoletin compound that have strong antioxidant properties with  $IC_{50}$  prediction is lower than  $18.5 \mu\text{M}$  based on low BDE, SET-PT, PA, and ETE values compared scopoletin and other modified scopoletin compounds. Antioxidant properties of scopoletin and modified scopoletin compounds can be explained by the mechanism of Atomic Hydrogen Transfer (TAH) with BDE values ranging from  $69.986 - 90.510 \text{ kcal/mol}$  in the gas phase. Compounds **1**, **2**, **3**, **4**, **5**, and **10** are not toxic (no risk) for gene mutation, tumors, irritation, and reproduction. Scopoletin are medium risk for reproduction. Whereas Compounds **6**, **7**, **8**, and **9** are high risk (toxic) for reproduction. Scopoletin and modified scopoletin compound (**1-10**) has a positive drug score (0.270-0.503) which indicates that the compound has similar drug properties that are comparable to existing drugs. Compounds **1**, **2**, **3**, **4**, **5**, and **10** are estimated to be used as a potential antioxidant on biological systems.

**Keywords:** Computational chemistry, scopoletin, modified scopoletin, antioxidant, toxicity, drug score.