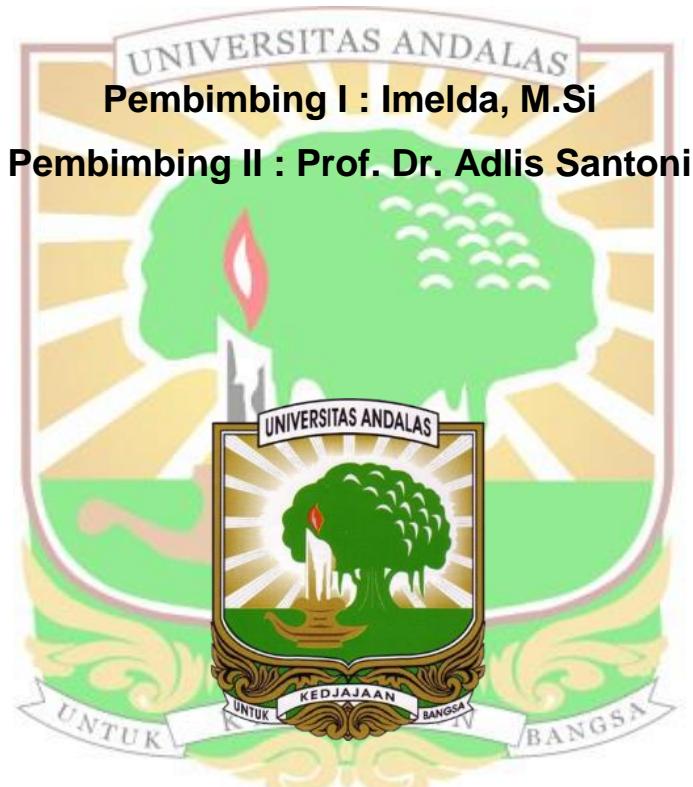


**STUDI KOMPUTASI AKTIVITAS ANTIOKSIDAN DAN SITOTOKSIK
SENYAWA TURUNAN XANTON**

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh :
MUSTIKA AISYAH PUTRI
BP : 1710412040



**PROGRAM STUDI SARJANA
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2021**

INTISARI

STUDI KOMPUTASI AKTIVITAS ANTIOKSIDAN DAN SITOTOKSIK SENYAWA TURUNAN XANTON

Oleh:

Mustika Aisyah Putri (BP : 1710412040)

Imelda, M.Si*, Prof. Dr. Adlis Santoni*

*Pembimbing

Senyawa turunan xanton merupakan kelompok senyawa bioaktif yang memiliki sifat antioksidan tinggi yang banyak terkandung dalam kulit buah manggis. Sifat antioksidan dan sitotoksik pada senyawa turunan xanton (α -mangostin, β -mangostin, 9-hidroxycalabaxanton, 3-isomangostin, Gartanin, 8-desoxygartanin) dianalisis dengan menggunakan metode DFT/B3LYP/6-31G. Berdasarkan parameter kereaktifannya didapatkan aktivitas antioksidan senyawa turunan xanton relatif sama. Analisis toksisitas senyawa turunan xanton menggunakan program OSIRIS yang menunjukkan bahwa senyawa turunan xanton memenuhi aturan Lipinski sebagai kandidat obat, tidak bersifat tumorgenetik dan tidak menyebabkan iritasi. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (HKSA) senyawa turunan xanton dilakukan berdasarkan analisis regresi multilinear dengan menggunakan program SPSS. Analisis ini berguna untuk menunjukkan sifat antioksidan dan sitotoksik pada senyawa turunan xanton dengan menghitung nilai BDE, IP, PDE, PA dan ETE pada mekanisme reaksi HAT, SET-PT, dan SPLET. Dari hasil, mekanisme yang cocok pada penelitian ini adalah mekanisme SET-PT karena dihasilkan energi total IP+PDE yang lebih kecil. Adapun persamaan HKSA terpilih untuk aktivitas antioksidan dan sitotoksik yaitu :

Pada aktivitas antioksidan :

$$Y = -29.603 + (-6.832) (\text{IP}) + (-3.447) (\text{PDE}) + 3.237 (\text{ETE})$$

Pada aktivitas sitotoksik :

$$Y = 30.240 + 7.303 (\text{qC}_1) + 35.604 (\text{qO}) + (-0.026) (\text{Pol}) + (-0.285) (\text{moment dipol}) + (-0.567) (\text{E}_{\text{LUMO}})$$

Berdasarkan studi *docking* molekular pada senyawa turunan xanton secara keseluruhan molekul 3-isomangostin dan gartanin memiliki interaksi yang lebih banyak dengan protein, sehingga lebih potensial sebagai kandidat obat.

Kata Kunci : xanton, DFT, HKSA, antioksidan, toksisitas, *docking*

ABSTRACT

COMPUTATIONAL STUDY OF ANTIOXIDANT AND CYTOTOXIC ACTIVITY OF XANTHONE DERIVATIVES

By:

Mustika Aisyah Putri (BP : 1710412040)
Imelda, M.Si*, Prof. Dr. Adlis Santoni*

*Supervisor

Xanthone derivatives are a group of bioactive compounds that have high antioxidant properties contained in the mangosteen rind. The antioxidant and cytotoxic properties of xanthone derivatives (α -mangostin, β -mangostin, 9-hydroxycalabaxanthone, 3-isomangostin, gartanin, 8-desoxygartanin) were analyzed using the DFT/B3LYP/6-31G method. Based on the reactivity parameter, it was found that the antioxidant activity of xanthone-derived compounds was relatively the same. Toxicity analysis of xanthone-derived compounds was analyzed using the OSIRIS program which showed that xanthone-derived compounds complied with Lipinski's rules as drug candidates, were not tumor genetic, and did not cause irritation. Analysis of the Quantitative Structure-Activity Relationship (HKSA) of xanthone-derived compounds was carried out based on multilinear regression analysis using the SPSS program. This analysis is useful for showing antioxidant and cytotoxic properties of xanthone-derived compounds by calculating the values of BDE, IP, PDE, PA, and ETE on the reaction mechanism of HAT, SET-PT, and SPLET. With this mechanism, the suitable mechanism in this study is the SET-PT mechanism because it produces smaller total energy of IP+PDE. The selected HKSA equations for antioxidant and cytotoxic activity are:

In antioxidant activity :

$$Y = -29.603 + (-6.832) (IP) + (-3.447) (PDE) + 3.237 (ETE)$$

in citotoxyc activity :

$$Y = 30.240 + 7.303 (qC_1) + 35.604 (qO) + (-0.026) (Pol) + (-0.285) (\text{momen dipol}) + (-0.567) (E LUMO)$$

Based on molecular docking studies on xanthone-derived compounds, overall 3-isomangostin and gartanin molecules have more interactions with proteins, so they are more potent as drug candidates.

Key Words : xanthone, DFT, HKSA, antioxidant, toxicity, docking