

**STUDI TEORITIK AKTIVITAS ANTIOKSIDAN DAN MOLECULAR  
DOCKING SENYAWA KURKUMIN DAN TURUNANNYA**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**Oleh :**

**RIEFKYANSYAH**

**1710412004**



**Dosen Pembimbing I : Imelda, M.Si**

**Dosen Pembimbing II : Emil Salim, M.Sc, M.Si**

**PROGRAM STUDI SARJANA**

**JURUSAN KIMIA**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**PADANG**

**2021**

**STUDI TEORITIK AKTIVITAS ANTIOKSIDAN DAN MOLECULAR  
DOCKING SENYAWA KURKUMIN DAN TURUNANNYA**

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**Oleh :**

**RIEFKYANSYAH**

**1710412004**



Skripsi diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Jurusan Kimia Fakultas  
Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Andalas

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

## INTISARI

### STUDI TEORITIK AKTIVITAS ANTIOKSIDAN DAN MOLECULAR DOCKING SENYAWA KURKUMIN DAN TURUNANNYA

Oleh:

Riefkyansyah (BP: 1710412004)

Imelda, M.Si\*, Emil Salim, M.Sc, M.Si\*

\*Pembimbing

Kurkumin adalah salah satu senyawa metabolit sekunder aktif yang terdapat pada kunyit. Studi teoritik pada struktur, sifat antioksidan dari senyawa kurkumin dan turunannya yaitu demetoksikurkumin, bisdemetoksikurkumin, tetrahidrokurkumin (bentuk keto) dan tetrahidrokurkumin (bentuk enol) dipelajari melalui metode DFT (*Density Functional Theory*) dan basis set B3LYP/6-31G dalam fase gas, pelarut air dan sikloheksan. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) molekul kurkumin dan turunannya dengan aktivitas antioksidan dilakukan berdasar persamaan regresi multilinear menggunakan program SPSS. Parameter pengukuran antioksidan seperti nilai *Bond Dissotiation Enthalpy* (BDE), *Ionisation Potential* (IP), *Proton Dissociation Enthalpy* (PDE), *Proton Affinity* (PA) dan *Electron Transfer Enthalpy* (ETE) dari senyawa kurkumin dan turunannya menunjukkan bahwa senyawa demetoksikurkumin menjadi senyawa yang paling baik aktivitas antioksidannya. Senyawa kurkumin dan turunannya yang menggunakan pelarut air dan sikloheksan dapat menurunkan nilai BDE, IP, PDE, PA dan ETE dan kurkumin lebih reaktif dalam pelarut sikloheksan. Hasil perhitungan analisis reaktivitas global menunjukkan bahwa molekul senyawa demetoksikurkumin yang terbaik sebagai senyawa antioksidan, dan juga antara demetoksikurkumin aglikosida dengan demetoksikurkumin glikosida menunjukkan bahwa demetoksikurkumin aglikosida sedikit lebih reaktif dibandingkan dengan demetoksikurkumin glikosida. Persamaan HKSA (Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas) yang terbaik untuk aktivitas antioksidan adalah:

$$Y = -4,839 + (2,558)(IP) + (-0,266)(PDE) + (0,903)(ETE)$$

(n=4; R<sup>2</sup> = 1; SD=0,0962906)

Studi farmakofor dari senyawa kurkumin dan turunannya memperlihatkan interaksi yang terbaik pada senyawa demetoksikurkumin dengan reseptor kanker payudara MCF-7 dengan menghasilkan energi dokingnya paling negatif -6,2463 kkal/mol, dan juga jumlah ikatan terbanyak dengan protein sel kanker payudara.

**Kata kunci:** Kurkumin, DFT, HKSA, antioksidan, doking

## ABSTRACT

### THEORETICAL STUDY OF ANTIOXIDANT AND MOLECULAR DOCKING OF CURCUMIN COMPOUNDS AND ITS DERIVATIVES

By:

Riefkyansyah (BP: 1710412004)

Imelda, M.Si\*, Emil Salim, M.Sc, M.Si\*

\*Supervisor

Curcumin is one of the active secondary metabolites found in turmeric. Theoretical studies on the structure, antioxidant properties of curcumin compounds and their derivatives namely demethoxycurcumin, bisdemethoxycurcumin, tetrahydrocurcumin (keto form) and tetrahydrocurcumin (enol form) were studied using DFT (Density Functional Theory) method and B3LYP/6-31G basis set in gas phase, solvent water and cyclohexane. Analysis of the Quantitative Structure and Activity Relationship (HKSA) of curcumin molecules and their derivatives with antioxidant activity was carried out based on multilinear regression equations using the SPSS program. Antioxidant measurement parameters such as Bond Dissociation Enthalpy (BDE), Ionization Potential (IP), Proton Dissociation Enthalpy (PDE), Proton Affinity (PA) and Electron Transfer Enthalpy (ETE) values of curcumin and its derivatives indicate that demethoxycurcumin is the most potent compound. good antioxidant activity. Curcumin compounds and their derivatives using water and cyclohexane as solvents can reduce BDE, IP, PDE, PA and ETE values and curcumin is more reactive in cyclohexane solvent. The results of the calculation of global reactivity analysis showed that the demethoxycurcumin molecule was the best as an antioxidant compound, and also between demethoxycurcumin aglycoside and demethoxycurcumin glycosides showed that demethoxycurcumin aglycoside was slightly more reactive than demethoxycurcumin glycosides. The best HKSA (Quantitative Relationship Structure and Activity) equation for antioxidant activity is:

$$Y = -4,839 + (2,558)(IP) + (-0,266)(PDE) + (0,903)(ETE)$$

(n=4; R<sup>2</sup> = 1; SD=0,0962906)

Pharmacophore studies of curcumin compounds and their derivatives showed the best interaction of demethoxycurcumin compounds with breast cancer receptors MCF-7 by producing the most negative docking energy of -6.2463 kcal/mol, and also the highest number of binding to breast cancer cell proteins.

**Key words:** Curcumin, DFT, HKSA, antioxidants, docking