BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Rimpang kunyit biasa ditemukan sebagai dalam bentuk tumbuhan disekitar kita atau bisa ditumbuhkan pada halaman rumah sehingga lebih mudah dicari. Penggunaan tumbuhan kunyit ini dikehidupan sebagai bumbu penyedap masakan serta mempunyai manfaat sebagai obat-obatan tradisional untuk menangani banyak macam jenis penyakit¹. Kunyit mengandung beberapa zat kimia yang mempunyai manfaat untuk tubuh manusia serta terkandung juga senyawa-senyawa yang bisa dijadikan obat adalah senyawa kurkuminoid yang terbagi menjadi kurkumin (1,7-bis(4-hidroksi-3-metoksifenil)-1,6-heptadiena-3,6-dion), demetoksikumin (1-(4-hidroksifenil)-7-(4-hidroksifenil)-1,6-heptadiena-3,5-dion),dan bisdemetoksikurkumin ((4-hidroksifenil)-1,6-heptadiena-3,5-dion)².

Senyawa kurkumin dapat menangkal radikal bebas dan menunjukkan aktivitas antioksidan yang baik terhadap beberapa bentuk radikal bebas yaitu anion superoksida, hidroksil radikal, dan oksigen radikal³. Pada penelitian lain, kurkumin juga menunjukkan kemampuan untuk menghambat karsinogenesis secara *in vivo* dan *in vitro*. Selain itu, kurkumin dapat menghambat pertumbuhan sel kanker serta pertumbuhan tumor⁴ dan bisa menurunkan beberapa aktivitas karsinogen dan mutagen yang sangat umum didalam beberapa jenis sel⁵.

Penelitian tentang aktivitas antioksidan senyawa turunan polifenol seperti kurkumin, kuersetin, petunidin dan alfamangostin secara komputasi telah dilakukan beberapa peneliti dengan metode *Density Functional Theory* (DFT). Kuersetin merupakan salah satu diantara beberapa senyawa yang punya aktivitas antioksidan yang baik dan telah dilakukan uji secara komputasi, dimana senyawa kuersetin adalah senyawa yang termasuk golongan flavonoid yang mempunyai beberapa aktivitas biologis yaitu anti inflamasi, anti anemia, anti kanker dan anti anafilaksis dan serta telah dimanfaatkan sebagai obat jantung, antibiotik, obat kanker⁶. Pada berbagai penelitian tentang aktivitas antioksidan suatu senyawa secara eksperimen maupun komputasi, kuersetin digunakan sebagai senyawa pembanding^{7,8}.

Penelitian sebelumnya belum ada yang mempelajari pengaruh struktur dan pelarut terhadap aktivitas antioksidan secara komputasi. Oleh karena itu, dilakukannya penelitian ini diharapkan bisa mengetahui bagaimana pengaruh struktur dan pelarut terhadap aktivitas antioksidan senyawa kurkumin dan turunannya secara teoritik dengan metode perhitungan komputasi yaitu *Density Functional Theory*⁹. Selain itu, penelitian ini juga mempelajari potensi dari senyawa

kurkumin dan turunannya sebagai penghambat pertumbuhan protein sel kanker payudara dengan mengamati bagaimana kestabilan ikatan, nilai energi ikatan dan interaksi ligan pada saat terikat pada protein secara *in silico* dengan melakukan *molekuler docking* secara komputasi.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dijelaskan sebelumnya, maka rumusan masalah yang dapat dikaji adalah:

- 1. Bagaimanakah pengaruh struktur dan pelarut terrhadap aktivitas antioksidan senyawa kurkumin dan turunannya secara teoritik?
- 2. Bagaimana persamaan aktivitas antioksidan senyawa kurkumin dan turunannya secara HKSA.
- 3. Bagaimanakah potensi senyawa kurkumin dan turunannya sebagai penghambat pertumbuhan protein sel kanker payudara secara komputasi?

1.3 Tujuan Penelitian

Dari perumusan masalah tersebut, maka penelitian ini bertujuan untuk :

- 1. Mengetahui pengaruh struktur dan pelarut terhadap aktivitas antioksidan senyawa kurkumin dan turunannya secara teoritik.
- 2. Menentukan persamaan dari aktivitas antioksidan senyawa kurkumin dan turunannya secara HKSA.
- 3. Mengetahui potensi senyawa kurkumin dan turunannya sebagai penghambat pertumbuhan protein sel kanker payudara secara komputasi.

1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat menyampaikan ilmu pengetahuan mengenai seberapa baiknya senyawa kurkumin dan turunannya sebagai antioksidan dan obat kanker payudara yang ditinjau melalui studi komputasi.