

**STUDI HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR DAN AKTIVITAS
(HKSA) SENYAWA TURUNAN EUGENOL SEBAGAI ANTIOKSIDAN**

Skripsi

Untuk memenuhi sebagian persyaratan

Mencapai derajat Sarjana S-1

Program Studi Kimia



Oleh:

Karisma Triatmaja

17106030013

**STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA**

**PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA**

2021



KEMENTERIAN AGAMA
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
Jl. Marsda Adisucipto Telp. (0274) 540971 Fax. (0274) 519739 Yogyakarta 55281

PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-906/Un.02/DST/PP.00.9/06/2021

Tugas Akhir dengan judul : Studi Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan Eugenol
Sebagai Antioksidan

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : KARISMA TRIATMAJA
Nomor Induk Mahasiswa : 17106030013
Telah diujikan pada : Jumat, 21 Mei 2021
Nilai ujian Tugas Akhir : A

dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketua Sidang

Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 60bd7ae8ed528



Penguji I

Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 60b6fd56b5a71



Penguji II

Sudarlin, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 60b5de61b2e6a



Yogyakarta, 21 Mei 2021
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 60be5273437a3

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Karisma Triatmaja
NIM : 17106030013
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul “**Studi Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan Eugenol Sebagai Antioksidan**” merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjana di suatu Perguruan Tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan orang lain, kecuali secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Yogyakarta, 7 Mei 2021



Karisma Triatmaja
NIM. 17106030013

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA



SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir

Lamp :

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Karisma Triatmaja
NIM : 17106030013
Judul Skripsi : Studi Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan Eugenol Sebagai Antioksidan

Sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam Program Studi Kimia.

Dengan ini kami berharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 5 Mei 2021

Pembimbing

Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si.

NIP: 19760621 199903 2 005



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga



FM-UINSK-BM-05-03/R0

NOTA DINAS KONSULTASI

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Lamp :-

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di Yogyakarta

Assalamu 'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Karisma Triatmaja

NIM : 17106030013

Judul Skripsi : Studi Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan Eugenol Sebagai Antioksidan

Sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya, kami ucapkan terimakasih.

Wassalamu 'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 18 Juni 2021

Konsultan

Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc.

NIP. 19900330 201903 1 008



NOTA DINAS KONSULTASI

Hal : Persetujuan Skripsi/Tugas Akhir

Lamp :-

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu 'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Karisma Triatmaja

NIM : 17106030013

Judul Skripsi : Studi Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan Eugenol Sebagai Antioksidan

Sudah benar dan sesuai ketentuan sebagai salah satu syarat memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Kimia.

Demikian kami sampaikan. Atas perhatiannya, kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu 'alaikum wr. wb.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 18 Juni 2021

Konsultan

Sudarlin, M.Si.

NIP. 19850611 201503 1 002

ABSTRAK

Kajian Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) telah dilakukan pada senyawa turunan eugenol dengan aktivitas antioksidan. Penelitian ini bertujuan untuk melakukan analisis HKSA senyawa turunan eugenol dan mengetahui model persamaan HKSA senyawa turunan eugenol. Data yang digunakan merupakan 21 data senyawa turunan eugenol yang telah di uji aktivitas antioksidannya menggunakan radikal DPPH secara eksperimen (*in vitro*) dari berbagai literatur.

Metode yang digunakan dalam perhitungan komputasi adalah perhitungan *Hartree Fock* dengan basis set 6-311G. Hasil perhitungan secara komputasi yang didapatkan kemudian dilakukan analisis menggunakan metode regresi *multilinear*. Hasil analisis HKSA yang ditunjukkan nilai R sebesar 0,973 yaitu nilai aktivitas prediksi telah mendekati nilai aktivitas eksperimen. Model persamaan terbaik HKSA disusun oleh deskriptor elektronik dengan parameter energi HOMO dan selisih energi HOMO-LUMO (Gap), deskriptor hidrofobik dengan parameter log P, dan deskriptor sterik dengan indeks balaban, dengan model persamaan:

$$\text{Log IC}_{50} = 6,442 + (26,257) \text{ HOMO} + (9,231) \text{ GAP} + (0,056) \text{ LOGP} - (0,433) \text{ BALABAN}$$

Kata kunci : *Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA), Turunan senyawa eugenol, antioksidan, regresi multilinear.*

MOTTO

“Do not go where the path may lead, go instead where there is no path and leave a trail”

“Jangan pergi mengikuti kemana jalan akan berujung, buat jalanmu sendiri dan tinggalkanlah jejak”

(Ralph Waldo Emerson)

“Gantungkan cita-cita mu setinggi langit, bermimpilah setinggi langit, jika engkau jatuh, engkau akan jatuh di antara bintang-bintang”

(Ir. Soekarno)



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSEMBAHAN

Ucapan syukur kepada Allah SWT yang telah melimpahkan segala rahmat dan karunia-Nya sehingga karya ini dapat saya persembahkan untuk Ayahanda dan Ibunda tercinta sebagai bentuk pertanggungjawaban atas amanah yang diberikan untuk menyelesaikan gelar Sarjana.

Karya ini juga saya dedikasikan untuk almamater
Program Studi Kimia, UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.



KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Allah SWT atas segala limpahan rahmat, hidayah, serta inayah-Nya, sehingga penulis mampu menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Senyawa Turunan Eugenol Sebagai Antioksidan”. Sholawat dan salam semoga senantiasa tercurahkan kepada Nabi Muhammad SAW yang telah membawa ajaran agama Islam yang sempurna dan menjadi anugerah bagi seluruh alam semesta.

Penyusunan skripsi ini sebagai bentuk untuk memenuhi salah satu persyaratan mencapai derajat Sarjana Kimia di Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga Yogyakarta. Selama penyusunan skripsi, penulis mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang telah memberikan ilmu, membantu dalam pelaksanaan, dan membantu dalam proses penyelesaian skripsi ini. Ucapan terimakasih tersebut penyusun sampaikan kepada:

1. Dr. Khurul Wardati, M.Si., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
2. Dr. Imelda Fajriati, M.Si., selaku Ketua Program Studi Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta.
3. Dr. Susy Yunita Prabawati, M.Si. selaku Dosen Pembimbing Skripsi yang selalu membimbing dan mengarahkan dalam penyusunan skripsi.
4. Priyagung Dhemi Widiakongko, M.Sc., selaku Dosen Program Studi Kimia yang selalu memberikan saran, bantuan, dan motivasi dalam penyusunan skripsi.
5. Irwan Nugraha, M.Sc., selaku Dosen Pembimbing Akademik yang selalu memberikan pengarahan selama studi.
6. Keluarga terutama kedua orang tua yang selalu membimbing, mendoakan, dan memberikan dukungan selama ini.
7. Teman – teman kimia angkatan 2017 yang selalu memberikan motivasi dan telah mewarnai perjalanan selama studi.
8. Semua pihak yang telah membantu penyusun dalam penyusunan skripsi yang tidak mungkin penyusun sebutkan satu persatu.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih membutuhkan banyak perbaikan baik dalam penulisan, pemilihan kata, dan isi. Oleh karena itu penulis sangat mengharapkan saran dan kritik sebagai perbaikan dalam penyusunan skripsi ini. Penulis berharap skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi semua pihak.

Yogyakarta, 30 April 2021

Karisma Triatmaja
NIM. 17106030013



DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
LEMBAR PENGESAHAN TUGAS AKHIR	ii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	iii
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	iv
NOTA DINAS KONSULTASI	v
ABSTRAK	vii
MOTTO	viii
HALAMAN PERSEMBAHAN	ix
KATA PENGANTAR	x
DAFTAR ISI.....	xii
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR TABEL.....	xvi
DAFTAR LAMPIRAN.....	xvii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang	1
B. Batasan Masalah.....	4
C. Rumusan Masalah	4
D. Tujuan Penelitian.....	5
E. Manfaat Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI	6
A. Tinjauan Pustaka	6
B. Landasan Teori	9
1. Turunan Senyawa Eugenol	9
2. Antioksidan	10

3. Metode Kimia Komputasi.....	11
4. Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA)	12
5. Deskriptor HKSA.....	12
6. Analisis Regresi <i>Multilinear</i>	14
C. Hipotesis Penelitian.....	14
BAB III METODE PENELITIAN.....	16
A. Waktu dan Tempat Penelitian	16
B. Alat – Alat Penelitian	16
1. Perangkat keras	16
2. Perangkat lunak.....	16
C. Bahan Penelitian.....	16
D. Cara Kerja Penelitian	16
1. Visualisasi struktur kimia senyawa.....	16
2. Optimasi geometri struktur	17
3. Perhitungan nilai deskriptor elektronik.....	17
4. Perhitungan nilai deskriptor sterik.....	17
5. Perhitungan nilai deskriptor hidrofobik.....	18
E. Teknik Analisis Data.....	18
1. Analisis statistika HKSA	18
2. Validasi persamaan HKSA	19
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	21
A. Pengumpulan Data Senyawa.....	21
B. Perhitungan Deskriptor Senyawa	25
C. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas	29
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	35
A. Kesimpulan.....	35
B. Saran	35

DAFTAR PUSTAKA	36
LAMPIRAN.....	40
CURRICULUM VITAE.....	50



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1. Struktur senyawa dasar eugenol.....	6
Gambar 2.2. Senyawa Eugenol.....	9
Gambar 4.1. Perubahan konformasi struktur senyawa isometil eugenol pada kedua sudut gugus metil (a) sebelum optimasi dan (b) setelah optimasi ..	25
Gambar 4.2. Orbital molekul HOMO dan LUMO dari senyawa 12.....	26
Gambar 4.3. Orbital molekul HOMO dan LUMO dari senyawa 9.....	27
Gambar 4.4. (a) Struktur eugenol dan (b) Struktur isoeugenol.....	29
Gambar 4.5. Grafik hubungan nilai log IC ₅₀ Eksperimen dengan nilai log IC ₅₀ Prediksi	33

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1. Senyawa analog eugenol dan data nilai IC ₅₀	21
Tabel 4.2. Hasil persamaan sebelum dilakukan eliminasi data outlier	30
Tabel 4.3. Hasil persamaan setelah dilakukan eliminasi data outlier	31



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Hasil perhitungan energi HOMO dan energi LUMO pada GaussView 5.0.8.	41
Lampiran 2. Hasil perhitungan log P pada MarvinSketch Trial	42
Lampiran 3. Hasil perhitungan MSA pada MarvinSketch Trial	43
Lampiran 4. Hasil perhitungan indeks topologi pada MarvinSketch Trial	44
Lampiran 5. Hasil perhitungan deskriptor elektronik	45
Lampiran 6. Hasil perhitungan deskriptor hidrofobik.....	46
Lampiran 7. Hasil perhitungan deskriptor sterik.....	47
Lampiran 8. Data nilai aktivitas eksperimen dengan data nilai aktivitas prediksi menggunakan persamaan terpilih	48
Lampiran 9. Hasil perhitungan menggunakan IBM SPSS 26.....	49



BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Penyakit kardiovaskular, kanker, diabetes, stroke, dan penyakit pernapasan kronis merupakan penyakit tidak menular atau *Noncommunicable Diseases* (NCDs). Data *World Health Organization* (WHO) pada tahun 2020 menunjukkan bahwa NCDs menjadi penyebab utama kematian di seluruh dunia. Kematian yang disebabkan NCDs sebesar 41 juta orang atau lebih dari 70% penyebab kematian di seluruh dunia. Penyebab dari timbulnya NCDs adalah pola hidup yang tidak sehat.

Pola hidup yang tidak sehat berasal dari makanan, minuman, dan udara yang membawa radikal bebas. Radikal bebas merupakan senyawa yang memiliki elektron tidak berpasangan dan bersifat sangat reaktif. Sifat reaktif ini menyebabkan radikal bebas dapat menarik atau menyerang elektron dari komponen seluler berupa lipid, protein, dan DNA (*deoxyribonucleic acid*). Hal ini dapat mengubah komponen seluler di sekitar radikal bebas menjadi suatu radikal baru. Senyawa radikal baru yang bertemu dengan komponen seluler lain dapat membentuk radikal baru lagi sehingga terjadi reaksi berantai dan dapat menyebabkan kerusakan struktur maupun kerusakan fungsi sel (Winarsi, 2007).

Reaksi berantai yang terus menerus membentuk senyawa radikal baru dapat berhenti apabila reaktivitasnya diredam oleh senyawa antioksidan. Antioksidan merupakan senyawa yang dapat memberikan elektron atau reduktan ke senyawa radikal (Winarsi, 2007). Antioksidan dapat bereaksi lebih cepat dengan radikal sehingga dapat melindungi komponen seluler dari interaksi langsung dengan senyawa radikal.

Salah satu senyawa yang berpotensi sebagai antioksidan adalah eugenol (da Silva dkk., 2018). Potensi antioksidan pada eugenol disebabkan adanya gugus fungsional fenol. Gugus fenol dapat berperan sebagai pemberi elektron atau atom hidrogen untuk menstabilkan radikal bebas (Aini dkk., 2007). Proses tersebut dapat mengubah gugus fenol menjadi radikal fenoksil. Radikal fenoksil

ini dapat menstabilkan diri melalui proses resonansi sehingga tidak terjadi lagi reaksi berantai pembentukan radikal (Janeiro dan Brett, 2004). Aktivitas antioksidan yang dipengaruhi oleh gugus fenol dalam eugenol ditunjukkan dengan nilai aktivitas yang beragam.

Aktivitas antioksidan eugenol telah dikaji oleh beberapa peneliti. Farias dkk. (2013) telah mengkaji aktivitas antioksidan eugenol secara *in vitro* terhadap radikal DPPH (2,2-difenil-1-pikrilhidrasil). Aktivitas antioksidan senyawa eugenol terhadap radikal DPPH dinyatakan sebagai EC_{50} yaitu konsentrasi yang efisien untuk mengurangi 50% dari radikal DPPH. Nilai EC_{50} aktivitas antioksidan senyawa eugenol yang didapatkan sebesar 72 μM . Da Silva dkk. (2018) juga telah mengkaji secara *in vitro* aktivitas antioksidan senyawa eugenol terhadap radikal DPPH. Aktivitas antioksidan senyawa eugenol terhadap radikal DPPH dinyatakan sebagai IC_{50} yaitu konsentrasi yang diperlukan senyawa eugenol untuk menstabilkan 50% dari radikal DPPH. Aktivitas antioksidan senyawa eugenol memiliki nilai IC_{50} sebesar 4,38 $\mu\text{g/mL}$. Kedua hasil penelitian ini dapat membuktikan bahwa senyawa eugenol memiliki potensi sebagai antioksidan.

Pengembangan turunan dari senyawa eugenol dapat dilakukan untuk meningkatkan aktivitas antioksidannya. Farias dkk. (2013) telah melakukan kajian secara *in vitro* turunan eugenol dengan memodifikasi struktur pada atom H gugus hidroksil. Senyawa turunan yang disintesis berjumlah 16 senyawa, tetapi hanya 4 senyawa yang memiliki nilai EC_{50} lebih kecil dari eugenol (EC_{50} : 72 μM). Da Silva dkk. (2018) juga melakukan kajian secara *in vitro* turunan eugenol dengan memodifikasi struktur pada gugus hidroksil dan pada ikatan rangkap. Senyawa turunan yang disintesis berjumlah 20 senyawa, tetapi hasil aktivitas dari modifikasi senyawa turunan eugenol hanya 7 senyawa yang mendekati nilai aktivitas dari eugenol (IC_{50} : 4,38 $\mu\text{g/mL}$).

Penelitian yang dilakukan oleh Farias dkk. (2013) dan da Silva dkk. (2018) menunjukkan bahwa sintesis senyawa turunan eugenol yang dilakukan menghasilkan aktivitas antioksidan yang lebih rendah daripada senyawa eugenol. Hal ini menunjukkan bahwa penelitian modifikasi senyawa turunan

eugenol secara *in vitro* memiliki efektivitas yang rendah dalam pencarian senyawa baru. Penggunaan metode lain untuk pengembangan senyawa antioksidan baru diperlukan agar mendapatkan efektivitas yang lebih baik.

Pengembangan senyawa antioksidan baru dapat lebih efektif menggunakan pendekatan pemodelan kimia komputasi atau secara *in silico*. Salah satu aplikasi kimia komputasi yang dapat diterapkan adalah kajian Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA). Kajian ini mempelajari korelasi secara kuantitatif antara struktur molekul dan nilai aktivitas biologis yang terukur secara eksperimen. Korelasi yang didapatkan merupakan suatu persamaan regresi HKSA. Persamaan tersebut kemudian dapat digunakan untuk mengevaluasi senyawa baru yang mendekati pemodelan suatu seri senyawa. (Siswandono, 2016).

Kajian senyawa eugenol dan turunannya dengan aktivitas antioksidan telah dilakukan Aini dkk. (2007). Penelitian yang dilakukan yaitu analisis Hubungan Struktur dan Aktivitas atau *Structure Activity Relationship* (SAR) antioksidan dari senyawa isoeugenol, eugenol, vanilin, dan turunannya secara *in vitro* dan *in silico*. Uji aktivitas antioksidan secara *in vitro* dilakukan dengan metode β -karoten. Metode tersebut didasarkan pada pemucatan warna emulsi sistem β -karoten dan asam oleat. Pemucatan warna dapat berpengaruh pada nilai absorbansi. Semakin kecil nilai absorbansinya maka semakin tinggi tingkat oksidasi yang terjadi pada sistem tersebut. Senyawa yang memiliki aktivitas lebih besar dari hasil eksperimen adalah isoeugenol > eugenol > vanilin. Evaluasi struktur juga dilakukan dengan kajian komputasi untuk mengetahui pengaruh substituen pada posisi para terhadap aktivitas antioksidan. Pengaruh tersebut dilihat dari energi pemutusan ikatan (BDE) menggunakan metode semiempirik AM1. Pengaruh BDE dapat dilihat dari kemudahan untuk melepaskan atom hidrogen sehingga adanya gugus substituen pendonor elektron dapat meningkatkan aktivitas antioksidan. Semakin kecil nilai BDE maka semakin mudah antioksidan untuk memberikan atom hidrogen ke senyawa radikal. Nilai entalpi pemutusan ikatan (BDE) berturut – turut adalah isoeugenol < eugenol < vanilin. Hal ini menunjukkan bahwa urutan kemudahan

antioksidan memberikan atom hidrogen ke radikal berturut – turut adalah isoeugenol > eugenol > vanilin.

Berdasarkan penelitian Aini dkk. (2007), kajian turunan eugenol dengan aktivitasnya secara *in vitro* dan komputasi memberikan data yang serupa. Hasil yang didapatkan dari urutan aktivitas antioksidan memberikan hasil yang sama dari metode eksperimen secara *in vitro* dan komputasi yaitu isoeugenol > eugenol > vanilin. Hal ini menunjukkan bahwa metode komputasi dapat dijadikan sebagai kajian yang efektif untuk memprediksi aktivitas dari suatu senyawa sebelum dilakukan secara *in vitro*.

Berdasarkan latar belakang tersebut maka penelitian ini digunakan pemodelan komputasi senyawa eugenol dan turunan eugenol beserta aktivitas antioksidannya untuk mendapatkan senyawa baru dengan aktivitas yang lebih baik. Data yang digunakan merupakan data dari senyawa yang telah disintesis dan telah diuji aktivitas antioksidannya. Data tersebut kemudian dianalisis ke dalam kajian HKSA sehingga didapatkan hasil suatu persamaan. Persamaan tersebut dapat menjadi dasar untuk memprediksi senyawa turunan dengan aktivitas antioksidan yang lebih tinggi daripada eugenol. Berdasarkan hal tersebut maka penelitian ini mengambil judul “Studi Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan Eugenol Sebagai Antioksidan”.

B. Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Pembuatan model persamaan HKSA senyawa eugenol dari 21 senyawa turunan eugenol yang telah diuji aktivitas antioksidannya (IC_{50}) menggunakan data eksperimen dari da Silva dkk. (2018), Sohilait dan Kainama (2019), dan Dhiman dkk. (2019).

C. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang, maka rumusan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Apakah senyawa turunan eugenol dengan aktivitas antioksidan dapat dilakukan analisis secara komputasi dengan metode Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas?
2. Bagaimana model persamaan Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas dari senyawa turunan eugenol?

D. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah, maka penelitian ini bertujuan untuk:

1. Melakukan analisis senyawa turunan eugenol dengan aktivitas antioksidan secara komputasi dengan metode Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas.
2. Menentukan model persamaan Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas senyawa turunan eugenol.

E. Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberi informasi tentang model persamaan Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas dari senyawa turunan eugenol terhadap aktivitas antioksidannya. Model persamaan tersebut diharapkan dapat menjadi acuan pengembangan senyawa baru modifikasi turunan eugenol yang mempunyai aktivitas antioksidan lebih tinggi dari eugenol secara teoritis.

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil dan pembahasan maka dapat disimpulkan bahwa:

1. Metode Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas dapat dilakukan untuk menganalisis senyawa turunan eugenol dengan aktivitas antioksidan yang ditunjukkan nilai R sebesar 0,973 yaitu nilai aktivitas prediksi telah mendekati nilai aktivitas eksperimen.
2. Model persamaan terbaik dari Hubungan Kuantitatif Struktur dan aktivitas dari senyawa turunan eugenol disusun oleh deskriptor elektronik dengan parameter energi HOMO dan selisih energi HOMO-LUMO (Gap), deskriptor hidrofobik dengan parameter log P, dan deskriptor sterik dengan indeks balaban, dengan model persamaan:

$$\text{Log IC}_{50} = 6,442 + (26,257) \text{ HOMO} + (9,231) \text{ GAP} + (0,056) \text{ LOGP} - (0,433) \text{ BALABAN}$$

B. Saran

Berdasarkan hasil penelitian ini, saran untuk penelitian selanjutnya adalah:

1. Perlu dilakukan pengembangan senyawa baru turunan eugenol dengan aktivitas antioksidan yang lebih baik menggunakan model persamaan yang telah dikaji.
2. Perlu dilakukan kajian HKSA turunan senyawa eugenol dengan metode perhitungan yang berbeda agar didapatkan perbandingan hasil yang lebih baik.

DAFTAR PUSTAKA

- Aini, Nur, Bambang Purwono, and Iqmal Tahir. 2007. "Structure – Antioxidant Activities Relationship Analysis of Isoeugenol, Eugenol, Vanilin and Their Derivatives." *Indonesian Journal of Chemistry* 7 (1): 61–66. <https://doi.org/10.22146/ijc.21714>.
- Arba, Muhammad, Riki Andriansyah, and Messi Leonita. 2016. "Studi Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas Senyawa Turunan Meisoinidigo Sebagai Inhibitor Cdk4." *Jurnal Kimia Riset* 1 (2): 129. <https://doi.org/10.20473/jkr.v1i2.3090>.
- Asmara, Anjar Purba, and Mudasir Dwi Siswanta. 2015. "Penentuan Metode Komputasi Untuk Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Dan Aktivitas Senyawa Turunan Triazolopiperazin Amida." *Journal of Islamic Science and Technology* 1 (1): 19–30.
- Asmuruf, Frans, Alowisya Futwembun, and Agnes Julia Kopeuw. 2017. "Karakteristik Struktur Elektronik Pada Senyawa Goniotalamin, Infektokaryon Dan Kurzicalkolakton Menggunakan Metode Density Functional Theory (DFT)." *AVOGADRO Jurnal Kimia* 1 (1): 1–5.
- Da Silva, Francisco Felipe Maia da, Francisco José Queiroz Monte, Telma Leda Gomes de Lemos, Patrícia Georgina Garcia do Nascimento, Alana Kelly de Medeiros Costa, and Luanda Misley Mota de Paiva. 2018. "Eugenol Derivatives: Synthesis, Characterization, and Evaluation of Antibacterial and Antioxidant Activities." *Chemistry Central Journal* 12 (34): 1–9. <https://doi.org/10.1186/s13065-018-0407-4>.
- Dehmer, Matthias, Kurt Varmuza, and Danail Bonchev. 2012. *Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR*. Weinheim: Wiley-Blackwell.
- Dhiman, Priyanka, Neelam Malik, and Anurag Khatkar. 2019. "Lead Optimization for Promising Monoamine Oxidase Inhibitor from Eugenol for the Treatment of Neurological Disorder: Synthesis and In Silico Based Study." *BMC Chemistry* 13 (38): 1–20. <https://doi.org/10.1186/s13065-019-0552-4>.
- Farias, D'Avila Marília, Pathise Souto Oliveira, Filipe S.Pereira Dutra, Thiely Jacobsen Fernandes, Claudio M.P. De Pereira, Simone Quintana De Oliveira, Francieli Moro Stefanello, Claiton Leonetti Lencina, and Alethéa Gatto Barschak. 2013. "Eugenol Derivatives as Potential Anti-Oxidants: Is Phenolic Hydroxyl Necessary to Obtain an Effect?" *Journal of Pharmacy and Pharmacology* 66 (5): 733–46. <https://doi.org/10.1111/jphp.12197>.
- Ferrari, Brian C., and Chris J. Bennett. 2019. "A Comparison of Medium-Sized Basis Sets for the Prediction of Geometries, Vibrational Frequencies, Infrared Intensities and Raman Activities for Water." *Journal of Physics: Conference Series* 1290 (1). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1290/1/012013>.
- Friesner, Richard A. 2005. "Ab Initio Quantum Chemistry: Methodology and

- Applications.” *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 102 (19): 6648–53.
<https://doi.org/10.1073/pnas.0408036102>.
- Janeiro, Patricia, and Ana Maria Oliveira Brett. 2004. “Catechin Electrochemical Oxidation Mechanisms.” *Analytica Chimica Acta* 518 (1–2): 109–15.
<https://doi.org/10.1016/j.aca.2004.05.038>.
- Kilo, Jafar La, and Akram La Kilo. 2019. “Kajian HKSA Antimalaria Senyawa Turunan Quinolon-4(1H)-Imines Menggunakan Metode MLR-ANN.” *Jambura Journal of Chemistry* 1 (1): 21–26.
<https://doi.org/10.34312/jambchem.v1i1.2104>.
- Lipinski, Christopher A., Franco Lombardo, Beryl W. Dominy, and Paul J. Feeney. 2012. “Experimental and Computational Approaches to Estimate Solubility and Permeability in Drug Discovery and Development Settings.” *Advanced Drug Delivery Reviews* 64 (SUPPL.): 4–17.
<https://doi.org/10.1016/j.addr.2012.09.019>.
- Male, Yusthinus T, I Wayan Sutapa, and Yulian A.D. Pusung. 2018. “Prediksi Potensi Antikanker Senyawa Turunan Xanthon Menggunakan Hubungan Kuantitatif Struktur Dan Aktivitas (HKSA).” *Chem. Prog.* 11 (1).
<https://doi.org/https://doi.org/10.35799/cp.11.1.2018.27608>.
- Mardianingrum, Richa, Aas Nuraisah, and Ruswanto. 2018. “Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas Antimalaria Senyawa Turunan Quinoline-Pyrazolopyridine.” *Journal of Pharmacopolium* 1 (3): 136–42.
- Nindita, Loita Datu, and Sanjaya IGM. 2014. “Modeling Hubungan Kuantitatif Struktur Dan Aktivitas (HKSA) Pinocembrin Dan Turunannya Sebagai Anti Kanker.” *UNESA Journal of Chemistry* 3 (2): 26–34.
- Nisa, FK, and Kasmui Harjito. 2015. “Uji Aktivitas Antioksidan Pada Modifikasi Senyawa Khrisin Dengan Gugus Alkoksi Menggunakan Metode Recife Model 1 (RM1).” *Jurnal MIPA* 38 (2): 160–68.
- Perwira, Grandys, Kasmui, and Subiyanto Hadisaputro. 2015. “Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas Antioksidan Senyawa Turunan Apigenin.” *Indonesian Journal of Chemical Science* 4 (3).
- Pranowo, Harno Dwi, and Abdul Kadir Rukman Hetadi. 2011. *Pengantar Kimia Komputasi*. Bandung: Lubuk Agung.
- Prasetya, Agung Tri, M Alauhdin, and Nuni Widiarti. 2010. “Simulasi Efektivitas Senyawa Obat Eritromisin F Dan \square 6,7 Anhidroeritromisin F Dalam Lambung Menggunakan Metode Semiempiris Austin Model 1 (AM1).” *Saintekno: Jurnal Sains Dan Teknologi* 8 (1): 95–104.
<https://doi.org/10.15294/saintekno.v8i1.343>.
- Puzyn, Tomasz, Jerzy Leszczyński, and Mark Cronin. 2010. *Recent Advances in QSAR Studies: Methods and Applications*. Edited by Jerzy Leszczyński. ... *Advances in Computational Chemistry* New York: Springer International

- Publishing. <http://link.springer.com/content/pdf/10.1007/978-1-4020-9783-6.pdf%5Cnhttp://books.google.com/books?id=stbWXjqgRDYC&pgis=1>.
- Rodrigo, Ramon. 2009. *Oxidative Stress and Antioxidants: Their Role in Human Disease*. New York: Nova Science Publishers.
- Santos, Cleydson B. R., Cleison C. Lobato, Francinaldo S. Braga, Sílvia S. S. Morais, Cesar F. Santos, Caio P. Fernandes, Davi S. B. Brasil, Lorane I. S. Hage-Melim, Williams J. C. Macêdo, and José C. T. Carvalho. 2014. "Application of Hartree-Fock Method for Modeling of Bioactive Molecules Using SAR and QSPR." *Computational Molecular Bioscience* 04 (01): 1–24. <https://doi.org/10.4236/cmb.2014.41001>.
- Schuchardt, Karen L., Brett T. Didier, Todd Elsethagen, Lisong Sun, Vidhya Gurumoorthi, Jared Chase, Jun Li, and Theresa L. Windus. 2007. "Basis Set Exchange: A Community Database for Computational Sciences." *Journal of Chemical Information and Modeling* 47 (3): 1045–52. <https://doi.org/10.1021/ci600510j>.
- Siswandono. 2016. *Kimia Medisinal*. Edisi Kedu. Surabaya: Airlangga University Press.
- Sohilait, JulianusHanoach, and Healthy Kainama. 2019. "Free Radical Scavenging Activity of Essential Oil of Eugenia Caryophyllata from Amboina Island and Derivatives of Eugenol." *Open Chemistry* 17 (1): 422–28. <https://doi.org/10.1515/chem-2019-0047>.
- Soleh, Agus M, and Aunuddin. 2013. "Lasso : Solusi Alternatif Seleksi Peubah Dan Penyusutan Koefisien Model Regresi Linier." *Indonesian Journal of Statistic* 18 (1): 21–27.
- Suryanto, Edi, and Chairil Anwar. 2008. "Sintesis Antioksidan 4,6-Dialil-2-Metoksifenol Dari Alil Eugenol Melalui Penataan Ulang Claisen." *Chem. Prog.* 1 (1): 1–8.
- Tjahjono, Hadi, and Qoonita Fadhilah. 2012. "Hubungan Kuantitatif Struktur Dan Aktivitas Senyawa Turunan 3-Haloasilaminobenzoilurea Sebagai Inhibitor Pembentukan Mikrotubulus." *Acta Pharmaceutica Indonesia* 37 (3): 76–82.
- Todeschini, Roberto, and Viviana Consonni. 2000. *Handbook of Molecular Descriptors*. Weinheim: Wiley-VCH.
- Urbaniak, Alicja, Marcin Molski, and Malgorzata Szlag. 2012. "Quantum-Chemical Calculations of the Antioxidant Properties of Trans - p -Coumaric Acid and Trans -Sinapinic Acid." *Computational Methods in Science and Technology* 18 (2): 1–12. <https://doi.org/10.12921/cmst.2012.18.02.117-128>.
- Utomo, Suryadi Budi, Fajar Sanubari, Budi Utami, and Nanik Dwi Nurhayati. 2017. "Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Dan Aktivitas Analgesik Senyawa Turunan Meperidin Menggunakan Metode Semiempiris AM1." *Jurnal Kimia Dan Pendidikan Kimia* 2 (3): 158–68.
- Winarsi, Hery. 2007. *Antioksidan Alami Dan Radikal Bebas*. Yogyakarta: Kanisius.

World Health Organization. 2020. *Non-Communicable Diseases Progress Monitor 2020*. World Health Organization. Geneva. https://doi.org/10.5005/jp/books/11410_18.

Yamagami, Chisako, Miki Akamatsu, Noriko Motohashi, Shogo Hamada, and Takao Tanahashi. 2005. "Quantitative Structure-Activity Relationship Studies for Antioxidant Hydroxybenzalacetones by Quantum Chemical- and 3-D-QSAR(CoMFA) Analyses." *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters* 15 (11): 2845–50. <https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2005.03.087>.

Yan, Xing, and Xiao Gang Su. 2009. *Linear Regression Analysis Theory and Computing. Technometrics*. Vol. 22. Singapore: World Scientific Publishing. <https://doi.org/10.2307/1268395>.



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

CURRICULUM VITAE

A. Biodata Pribadi

Nama : Karisma Triatmaja
 Tempat, Tanggal Lahir : Yogyakarta, 25 Agustus 1998
 Jenis Kelamin : Laki-Laki
 Agama : Islam
 Alamat Asal dan Tinggal: Mendungan UH 7/148a,
 Giwangan, Umbulharjo, Yogyakarta
 Email : karisma25081998@gmail.com
 No. Hp : 085743421934



B. Latar Belakang Pendidikan

SD Negeri Giwangan Yogyakarta	2005 – 2011
SMP Negeri 9 Yogyakarta	2011 – 2014
SMK-SMTI Yogyakarta	2014 – 2017
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta	2017 – 2021

C. Riwayat Organisasi

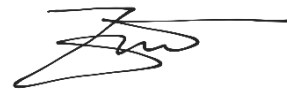
Kepala Departemen Keilmuan dan Riset Himpunan Mahasiswa Program Studi Kimia	2019 - 2020
Ketua Study Club Kimia Material Program Studi Kimia UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta	2020 - 2021

D. Riwayat Kepanitiaan

Anggota Divisi Acara Chemistry Festival and Competition (CFC) Himpunan Mahasiswa Program Studi Kimia UIN Sunan Kalijaga	2019
Ketua Kunjungan Industri Program Studi Kimia	2019
Penanggung Jawab Lomba Karya Tulis Ilmiah Sains dan Teknologi Invitasi Pekan Pengembangan Bakat dan Minat Mahasiswa (IPPBMM) UIN Sunan Kalijaga	2021

Saya menyatakan bahwa semua keterangan dalam *Curriculum Vitae* ini adalah benar dan apabila terdapat kesalahan, saya bersedia mempertanggungjawabkannya.

Yang menyatakan,



Karisma Triatmaja

