

ABSTRAK

SOTYANINGSIH, I., 2022 ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR-AKTIVITAS UNTUK STABILITAS SENYAWA ANTOSIANIN DAN AGLIKONNYA, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI SURAKARTA.

Antosianin merupakan senyawa yang dapat digunakan sebagai antioksidan, namun antosianin tersebut mudah terdegradasi disebabkan oleh suhu dan pH. Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk mengetahui persamaan dan deskriptor yang berhubungan dengan aktivitas antioksidan senyawa antosianin.

Dalam metode HKSA perlu dilakukan optimasi geometri struktur antosianin dengan menggunakan metode semiempirik AM1. Kemudian dilakukan perhitungan deskriptor. Deskriptor yang digunakan yaitu Log P, energi SOMO dan LUMO, muatan atom, momen dipol, polarisabilitas atom, TPSA, TASA, PSA, berat molekuler, *ionization potential*, *gravitation index*, refraktivitas molar, dan panas pembentukan. Nilai deskriptor yang diperoleh akan dilakukan analisis hubungan antara deskriptor dengan aktivitas antioksidan senyawa antosianin menggunakan metode MLR yang dapat dihasilkan persamaan. Persamaan tersebut akan divalidasi menggunakan LOO (*Leave One Out*), yang kemudian menghasilkan persamaan valid yang memiliki hubungan dengan aktivitas antioksidan antosianin.

Persamaan yang dapat berpengaruh pada peningkatan aktivitas biologis. yaitu $\text{Log IC}_{50} = 1.030088 + 0.005801 (\text{panas pembentukan}) - 0.01053 (\text{TASA}) - 0.14989 (\text{dipole}) + 0.36186 (\text{ionization potential}) + 0.043292 (\text{grav})$, dengan nilai R 0,955751 , R^2 0,913461, nilai F 2,887049 dan nilai Q^2 0,687414. Melalui persamaan tersebut diketahui deskriptor yang berhubungan dengan aktivitas antioksidan dan nilai Log IC_{50} prediksi. Berdasarkan nilai Log IC_{50} prediksi didapatkan bahwa terjadi kenaikan aktivitas antioksidan yang cukup baik.

Kata kunci : HKSA, antosianin, aktivitas antioksidan, stabilitas.

ABSTRACT

SOTYANINGSIH, I., 2022. QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP ANALYSIS OF ANTHOCYANIN AND THEIR AGLICONE FOR COMPOUND STABILITY, SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI SURAKARTA.

Anthocyanin is a compound used as an antioxidant, but pH and temperature can cause degradation of anthocyanin. The purpose of this study was to find descriptors and model have relation with antioxidant activity of anthocyanin.

In the QSAR method, it was necessary to optimize the geometry of the anthocyanin structure, which used semiempirical AM-1. Then calculate the descriptors. Descriptors used in this study were Log P, energy Somo and Lumo, polarizability, atomic polarity, TPSA, TASA, PSA, molecular weight, ionization potential, gravitation index, energy electronic, atomic charge, dipole, nta, molar refractivity, and heat of formation. The descriptors value obtained will be analyzed to determine the relationship between the descriptor with antioxidant activity. It used the MLR method, which can produce a model. The model will be validated using LOO (leave one Out), then can create the validated model that is related to antioxidant activity of anthocyanin.

The model could increase the biological activity of anthocyanin by Log IC50= $1.030088 + 0.005801$ (heat of formation) - 0.01053 (TASA) - 0.14989 (dipole) + 0.36186 (ionization potential) + 0.043292 (grav). The model has values of R, R², F and Q² of 0,955751 (R); 0,913461 (R²); 2,887049 (F); and 0,687414 (Q²). Based on the model, it knows that the descriptors have relationship with antioxidant activity and the predicted Log IC50 value. Based on the predicted Log IC50 value, it was found that there was an increase in antioxidant activity, which was good.

Keyword : QSAR, anthocyanin, antioxidant activity, stability .