

Penentuan Aktivitas Antioksidan Mirisetin, Quersetin Dan Kaempferol Berdasarkan Metode Semiempiris *Austin Model* (AM 1)

Azuxetullatif

Fakultas Ilmu Kesehatan¹, Universitas Sumatera Barat, Jln Raya Padang Bukittinggi KM 36 Lubuk Alung
email: azuxetullatif@gmail.com

Abstract

Research has been conducted on the determination of antioxidant activity using the parameters of Bond Dissociation Enthalpy (BDE), Single Electron Transfer-Proton Transfer (SET-PT), Proton Affinity (PA), and Electron Transfer Enthalpy (ETE) of myricetin, quercetin, and kaempferol compounds. Furthermore, through the geometric stages using the AM1 semi-empirical method. The results obtained showed that myricetin compounds have better antioxidant activity compared to quercetin and kaempferol compounds by considering the results of high BDE values, low SET-PT, high PA, and low ETE.

Keywords: Mirisetin, Quersetin, Kaempferol, Semiempiris AM1, Antioksidan

This work is licensed under Creative Commons Attribution License 4.0 CC-BY International license



PENDAHULUAN [Times New Roman 12 bold]

Flavonoid banyak terdapat pada buah, bunga, dan sayuran. Struktur kerangka flavonoid dengan 15-karbon (C6-C3-C6) terdiri dari dua cincin aromatik yang dihubungkan oleh cincin piron dan pirana heterosiklik [1]–[3]. Flavonoid diprediksi dapat membantu mencegah terjadinya kerusakan sel yang disebabkan oleh terpaparnya radikal bebas (ROS)[4]. Mirisetin, quersetin dan kaempferol termasuk dalam kelompok pigmen tumbuhan yang disebut flavonoid [5]. Mirisetin memiliki kemampuan yang dapat mengurangi peroksidasi lipid, dan melindungi tubuh dari pertumbuhan sel kanker, selain itu mirisetin telah terbukti dapat menekan sitokin inflamasi, agregasi

trombosit dan mengendalikan infeksi virus dengan mengganggu jalur replikasi DNA [6]. Quersetin mampu melindungi tubuh dari penyakit jantung dan kanker. Sifat antioksidan quersetin juga dapat membantu menstabilkan sel-sel yang melepaskan hormon histamin dalam tubuh dan memiliki efek anti-inflamasi [7]. Kaempferol digunakan untuk pengobatan seperti penyakit kardiovaskular, diabetes, asma, stres oksidatif, dan infeksi mikroba [8].

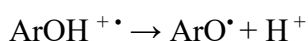
Antioksidan merupakan senyawa yang dapat memperlambat atau menghambat terjadinya kerusakan oleh radikal bebas[9]. Mirisetin, quersetin dan Kaempferol merupakan bagian dari antioksidan fenolik (ArOH) yang mampu menghambat oksidasi atom H dan mentransferkan fenolik ke rantai radikal

(ROO'), sehingga menghasilkan produk non-radikal (ROOH). Mekanisme antioksidan [10]:

1. Disosiasi ikatan entalpi (BDE) merupakan entalpi reaksi transfer H-atom (HAT), dimana semakin rendah BDE semakin mudah disosiasi fenolik O-H obligasi.



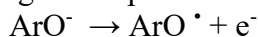
2. Transfer elektron tunggal diikuti dengan transfer proton (SET-PT) berlangsung dalam dua langkah.



3. Afinitas proton (PA) dari fenoksida yang ter-anion.



4. Entalpi transfer elektron (ETE) dari anion fenoksida untuk ROO• dan radikal fenoksi terbentuk. Langkah entalpi reaksi ini dilambangkan sebagai entalpi transfer elektron.



Entalpi total H(X) pada temperatur T biasanya menggunakan persamaan berikut [11]:

$\text{H(X)} = \text{E}_0 + \text{ZPE} + \Delta\text{H}_{\text{trans}} + \Delta\text{H}_{\text{rot}} + \Delta\text{H}_{\text{vib}} + \text{RT}$, maka dapat dihitung nilai BDE, SET-PT, PA, dan ETE menggunakan persamaan dibawah ini :

$$\text{BDE} = \text{H}(\text{ArO}^\bullet) + \text{H}(\text{H}^\bullet) - \text{H}(\text{ArOH})$$

$$\text{SET-PT} = \text{H}(\text{ArO}^\bullet) + \text{H}(\text{e}^-) + \text{H}(\text{H}^+) - \text{H}(\text{ArOH})$$

$$\text{PA} = \text{H}(\text{ArO}^-) + \text{H}(\text{H}^+) - \text{H}(\text{ArOH})$$

$$\text{ETE} = \text{H}(\text{ArO}^\bullet) + \text{H}(\text{e}^-) - \text{H}(\text{ArO}^-)$$

Penelitian sebelumnya menunjukkan bahwa tiga senyawa ini (mirisetin, quersetin dan kaempferol) memiliki aktivitas antioksidan yang tinggi [12][13]. Peneliti tertarik melakukan studi teoritis dalam penentuan aktivitas antioksidan dari senyawa mirisetin, quersetin, dan kaempferol secara teoritis menggunakan metode semi-empiris *Austin Model 1* (AM1). Data yang diambil adalah nilai dari BDE, SET-PT, PA dan ETE yang

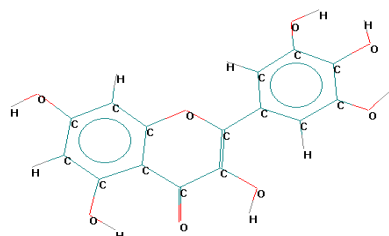
didapatkan dari peritungkan pada keadaan dasar tanpa ada substitusi.

METODE PENELITIAN

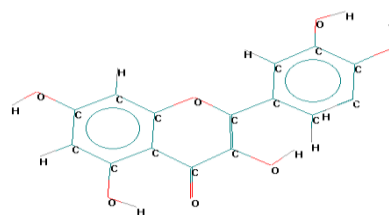
Penelitian ini menggunakan molekul mirisetin, quersetin, dan kaempferol. Peralatan yang digunakan adalah perangkat keras berupa komputer dengan prosesor Intel® inside Celeron 847@1,1Ghz (2CPUs), RAM 2Gb, perangkat lunak kimia komputasi program Hyperchem 7.0.

HASIL DAN PEMBAHASAN

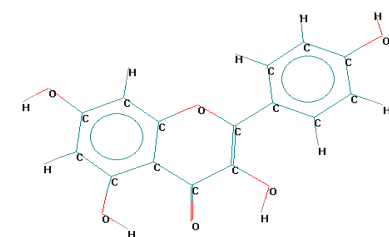
Optimasi geometri molekul mirisetin, quersetin, dan kaempferol didapatkan struktur geometri yang stabil. Hasil optimasi geometri dapat dilihat pada gambar dibawah.



Gambar 1. Hasil Optimasi Molekul Mirisetin



Gambar 2. Hasil Optimasi Molekul Quersetin



Gambar 3. Hasil Optimasi Molekul Kaempferol

Hasil perhitungan aktivitas antioksidan prediksi didapatkan nilai BDE, SET-PT, PA, dan ETE seperti pada tabel 1.

Tabel 1. Nilai BDE, SET-PT, PA, dan ETE hasil perhitungan optimasi.

N o	Senyawa	BDE	SET- PT	PA	ETE
1	Mirisetin	- 1554 ,591 539	25,02 4261	- 146, 9110 76	267,3 47511
2	Quersetin	- 1534 ,673 076	44,94 2774	- 277, 7856 06	322,7 28331
3	Kaempfer ol	- 1143 ,256 205	120,4 36435	276, 6540 34	301,6 78295

Berdasarkan perhitungan dari tabel 1 senyawa mirisetin memiliki nilai BDE lebih rendah dibandingkan senyawa quersetin dan kaempferol, yaitu -1554,591539 Kkal/mol. Hal ini disebabkan karena senyawa mirisetin memiliki lebih banyak gugus hidroksi (OH) sehingga lebih mudah mengalami disosiasi fenolik obligasi, dapat diprediksi untuk menghambat reaksi oksidasi oleh atom H dan mentransfer fenolik kerantai peroxyyl pembawa radikal (ROO $\cdot$) menghasilkan produk non-radikal (ROOH)[14]. Hasil nilai SET-PT yang paling rendah menunjukkan bahwa energi yang dihasilkan senyawa mirisetin kecil untuk menerima proton, sehingga dapat diprediksi senyawa mirisetin tidak aktif untuk mentransferkan proton (H $^+$) dan efektif menangkalkan radikal bebas dengan reaksi proton disosiasi [15].

Afinitas proton (PA) diprediksi senyawa mirisetin dengan nilai -1456,911076 Kkal/mol mudah untuk menerima proton dalam menetralkan radikal bebas yang bersifat reaktif, semakin tinggi afinitas proton maka semakin mudah molekul tersebut menangkap proton [16]. Sedangkan untuk hasil nilai transfer elektron (ETE) senyawa mirisetin

memiliki nilai yang paling rendah sebesar 267,347511 Kkal/mol, hal ini menunjukkan bahwa energi yang dibutuhkan senyawa mirisetin untuk melepaskan elektron kecil dan dengan mudah menetralkan radikal bebas [17].

SIMPULAN

Berdasarkan analisis hasil penelitian yang telah dilakukan senyawa mirisetin, quersetin dan kaempferol dengan menggunakan metode semi-empiris *Austin Model 1* (AM1) dengan parameter BDE, SET-PT, PA dan ETE, dapat disimpulkan bahwa senyawa mirisetin memiliki aktivitas antioksidan lebih tinggi dibandingkan dari senyawa quersetin dan kaempferol. Hasil perhitungan nilai BDE tinggi, SET-PT rendah, PA tinggi, ETE rendah yang membuktikan bahwa senyawa mirisetin lebih efektif menangkalkan radikal bebas.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] Y. Yao *et al.*, "Preformulation studies of myricetin: A natural antioxidant flavonoid," *Pharmazie*, vol. 69, no. 1, pp. 19–26, 2014, doi: 10.1691/ph.2014.3076.
- [2] T. Wang, Q. Li, and K. Bi, "Bioactive flavonoids in medicinal plants: Structure, activity and biological fate," *Asian J. Pharm. Sci.*, vol. 13, no. 1, pp. 12–23, 2018, doi: 10.1016/j.ajps.2017.08.004.
- [3] J. Shin, H. Jung, A. Harikishore, O. Kwon, and H. Sup, "Biochemical and Biophysical Research Communications The flavonoid myricetin reduces nocturnal melatonin levels in the blood through the inhibition of serotonin N-acetyltransferase," *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, vol. 440, no. 2, pp. 312–316, 2013, doi: 10.1016/j.bbrc.2013.09.076.
- [4] Y. Hou, Y. Wang, X. Tan, Y. Wang, W. Li, and X. Li,

- “Investigating the Antioxidant Efficiency of Tea Flavonoid Derivatives: A Density Functional Theory Study,” *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 26, no. 6, pp. 1–14, 2025, doi: 10.3390/ijms26062587.
- [5] K. C. Ong, “Biological Effects of Myricetin,” vol. 29, no. 2, pp. 121–126, 1997.
- [6] S. A. d. S. Farias, K. M. L. Rocha, É. C. M. Nascimento, R. do C. C. de Jesus, P. R. Neres, and J. B. L. Martins, “Docking and Electronic Structure of Rutin, Myricetin, and Baicalein Targeting 3CLpro,” *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 24, no. 20, 2023, doi: 10.3390/ijms242015113.
- [7] A. Amić and D. Mastil’ák Cagardová, “A DFT Study on the Kinetics of HOO•, CH3OO•, and O2•– Scavenging by Quercetin and Flavonoid Catecholic Metabolites,” *Antioxidants*, vol. 12, no. 6, 2023, doi: 10.3390/antiox12061154.
- [8] N. Sharma, S. Biswas, N. Al-Dayyan, A. S. Alhegaili, and M. Sarwat, “Antioxidant role of kaempferol in prevention of hepatocellular carcinoma,” *Antioxidants*, vol. 10, no. 9, pp. 1–17, 2021, doi: 10.3390/antiox10091419.
- [9] Q. V. Vo, P. C. Nam, M. Van Bay, N. M. Thong, N. D. Cuong, and A. Mechler, “Density functional theory study of the role of benzylic hydrogen atoms in the antioxidant properties of lignans,” *Sci. Rep.*, vol. 8, no. 1, pp. 1–10, 2018, doi: 10.1038/s41598-018-30860-5.
- [10] A. Kowalska-Baron, “Theoretical Insight into Antioxidant Mechanism of Caffeic Acid Against Hydroperoxyl Radicals in Aqueous Medium at Different pH-Thermodynamic and Kinetic Aspects,” *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 25, no. 23, 2024, doi: 10.3390/ijms252312753.
- [11] M. Van Bay *et al.*, “Theoretical Study on the Antioxidant Activity of Natural Depsidones,” *ACS Omega*, vol. 5, no. 14, pp. 7895–7902, 2020, doi: 10.1021/acsomega.9b04179.
- [12] M. Rials and M. E. T. H. Ods, “Flavonoid (Myricetin, Quercetin, Kaempferol, Luteolin, and Apigenin) Content of Edible Tropical Plants.”
- [13] M. Olszowy-Tomczyk and D. Wianowska, “Antioxidant Properties of Selected Flavonoids in Binary Mixtures—Considerations on Myricetin, Kaempferol and Quercetin,” *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 24, no. 12, 2023, doi: 10.3390/ijms241210070.
- [14] R. Li, T. Du, J. Liu, A. J. A. Aquino, and J. Zhang, “Theoretical Study of O-CH3 Bond Dissociation Enthalpy in Anisole Systems,” *ACS Omega*, vol. 6, no. 34, pp. 21952–21959, 2021, doi: 10.1021/acsomega.1c02310.
- [15] A. Miličević, “Flavonoid Oxidation Potentials and Antioxidant Activities-Theoretical Models Based on Oxidation Mechanisms and Related Changes in Electronic Structure,” *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 25, no. 9, pp. 1–13, 2024, doi: 10.3390/ijms25095011.
- [16] A. H. Bakheit *et al.*, “Theoretical study of the antioxidant mechanism and structure-activity relationships of 1,3,4-oxadiazol-2-ylthieno[2,3-d]pyrimidin-4-amine derivatives: a computational approach,” *Front. Chem.*, vol. 12, no. July, pp. 1–16, 2024, doi: 10.3389/fchem.2024.1443718.
- [17] Y. Wang, C. Li, Z. Li, M. Moalin, G. J. M. de Hartog, and M. Zhang, “Computational Chemistry Strategies to Investigate the Antioxidant Activity of Flavonoids—An Overview,” *Molecules*, vol. 29, no. 11, 2024, doi: 10.3390/molecules29112627.

