

ANALISIS AKTIVITAS ANTIOKSIDAN SENYAWA FLAVONOID DARI DAUN KELOR (*MORINGA OLEIFERA*) MENGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

RACHMAT GHALY



DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2024



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PERNYATAAN MENGENAI MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Analisis Aktivitas Antioksidan Senyawa Flavonoid dari Daun Kelor (*Moringa Oleifera*) Menggunakan Teori Fungsi Kerapatan” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Bogor, 14 Juni 2024

Rachmat Ghaly
G74170019

@Hak cipta milik IPB University

IPB University





ABSTRAK

RACHMAT GHALY. Analisis Aktivitas Antioksidan Senyawa Flavonoid dari Daun Kelor (*Moringa Oleifera*) Menggunakan Teori Fungsi Kerapatan. Dibimbing oleh FAOZAN AHMAD.

Perubahan gaya hidup dan pola makan manusia telah meningkatkan risiko penyakit degeneratif akibat oksidasi berlebihan dan pembentukan radikal bebas. Radikal bebas ini berhubungan dengan penyakit serius seperti aterosklerosis, diabetes, dan kanker. Antioksidan dari tanaman, seperti flavonoid dalam daun kelor (*Moringa Oleifera*) yaitu quercetin, myricetin dan kaempferol, dapat menghambat kerusakan oksidatif ini. Analisis sifat aktivitas antioksidan diperlukan untuk mengetahui senyawa flavonoid mana yang paling efektif dalam pembersihan radikal bebas. Metode perhitungan komputasi DFT dapat menjadi solusi dalam studi teoritis untuk menganalisis sifat tersebut, dengan fungsi *exchange-correlation* B3LYP dan basis set def2/SVP. Perhitungan yang dilakukan pada penelitian ini adalah optimasi molekul, frekuensi vibrasi, dan *single point energy* yang dilakukan pada fase gas dan fase pelarut air dengan nilai parameter pelarut air diambil dari model CPCM (*Conductor-like Polarizable Continuum Model*) pada *Software* ORCA 5.2.0 sebagai pelarut implisit (*Implicit Solvent*). Efektifitas antioksidan dianalisis berdasarkan tiga mekanisme interaksi senyawa flavonoid, yaitu HAT, SET-PT, dan SPLET dengan memperoleh nilai terendah dari parameter-parameter termodinamika berupa BDE, IP+PDE, dan PA+ETE pada ketiga mekanisme tersebut. Selanjutnya, dianalisis nilai perhitungan parameter reaktivitas global dengan nilai HOMO dan LUMO yang diperoleh dari perhitungan *single point energy* dari ketiga senyawa flavonoid tersebut pada fase gas dan fase pelarut air. Sifat antioksidan yang baik ditandai dengan nilai energi gap (ΔE) yang kecil, *electronegativity* (χ) yang tinggi, potensial kimia (μ) yang lebih positif, *hardness* (η) yang rendah, *softness* (σ) yang tinggi, *electrophilicity* (ω) yang besar, *nucleophilicity* (ϵ) yang kecil, energi ionisasi (*IE*) yang rendah, dan afinitas elektron (*EA*) yang tinggi.

Kata kunci: antioksidan, DFT, CPCM, Quercetin, Myricetin dan Kaempferol

ABSTRACT

RACHMAT GHALY. Analysis of Antioxidant Activity of Flavonoid Compounds from *Moringa Oleifera* Leaves Using Density Functional Theory. Supervised by FAOZAN AHMAD.



Human lifestyle and dietary habits have increased the risk of degenerative diseases due to excessive oxidation and the formation of free radicals. These free radicals are associated with serious diseases such as atherosclerosis, diabetes, and cancer. Plant-based antioxidants, such as the flavonoids quercetin, myricetin, and kaempferol found in *Moringa Oleifera* leaves, can inhibit this oxidative damage. Analyzing the antioxidant activity properties is necessary to determine which flavonoid compounds are most effective in free radicals scavenging. Computational DFT calculations can be a solution in theoretical studies to analyze these properties, using the B3LYP exchange-correlation function and def2/SVP basis set. The calculations performed in this study include molecular optimization, vibrational frequencies, and single point energy, conducted in both gas phase and aqueous solvent phase, with the aqueous solvent parameters taken from the CPCM (Conductor-like Polarizable Continuum Model) model in ORCA 5.2.0 software as the implicit solvent. Antioxidant effectiveness is analyzed based on three interaction mechanisms of flavonoid compounds, namely HAT, SET-PT, and SPLET, by obtaining the lowest values of thermodynamic parameters such as BDE, IP+PDE, and PA+ETE in these three mechanisms. Furthermore, the global reactivity parameters are analyzed with HOMO and LUMO values obtained from single point energy calculations of the three flavonoid compounds in both gas phase and aqueous solvent phase. Good antioxidant properties are indicated by a small energy gap (ΔE), high electronegativity (χ), more positive chemical potential (μ), low hardness (η), high softness (σ), large electrophilicity (ω), small nucleophilicity (ϵ), low ionization energy (IE), and high electron affinity (EA).

Keywords: Antioxidant, DFT, CPCM, Quercetin, Myricetin dan Kaempferol

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2024
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.

**ANALISIS AKTIVITAS ANTIOKSIDAN SENYAWA
FLAVONOID DARI DAUN KELOR (*MORINGA OLEIFERA*)
MENGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN**

RACHMAT GHALY

Skripsi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Departemen Fisika

**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2024**

@Hak cipta milik IPB University

IPB University





@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



Judul Skripsi : Analisis Aktivitas Antioksidan Senyawa Flavonoid dari Daun Kelor (*Moringa Oleifera*) Menggunakan Teori Fungsi Kerapatan

Nama : Rachmat Ghaly

NIM : G74170019

Disetujui oleh

Pembimbing 1:

Dr. Faozan, M.Si

NIP. 19790923 200701 1 001



Diketahui oleh

Ketua Departemen Fisika:

Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada W. P., S.Si., M.Si.

NIP. 19710604 199802 2 001



Tanggal Ujian: 02 Juli 2024

Tanggal Lulus: 02 Juli 2024



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT dan shalawat serta salam semoga tetap tercurahkan kepada Nabi Muhammad SAW. Berkat rahmat dan hidayah Allah SWT, penulis dapat menyelesaikan penelitian dan skripsi yang berjudul “Analisis Aktivitas Antioksidan Senyawa Flavonoid dari Daun Kelor (*Moringa Oleifera*) Menggunakan Teori Fungsi Kerapatan”. Dalam penulisan skripsi ini, penulis tidak terlepas dari dukungan berbagai pihak.

Oleh karena itu penulis ingin mengucapkan terima kasih kepada:

1. Kedua orang tua yaitu Bapak Almarhum Rais Taufiq Ollong dan Rosniyati Suwarda serta keluarga lainnya yang senantiasa selalu mendukung pendidikan dan cita-cita penulis serta selalu memberikan motivasi kepada penulis.
2. Bapak Dr. Faozan, M.Si., selaku dosen pembimbing utama, Bapak Abd. Djamil Husin, S.Si., M.Si., dan Bapak Dr. Agus Kartono, S.Si., M.Si., sebagai dosen penguji yang senantiasa memberikan masukan, arahan dan bimbingan yang sangat berarti bagi penulis.
3. Seluruh dosen Departemen Fisika IPB yang senantiasa memberikan ilmunya yang berharga selama penulis menempuh perkuliahan serta seluruh staf Departemen Fisika IPB terutama Bapak Firman Permana yang juga sangat mendukung dan turut membantu dalam pengurusan administrasi serta informasi.
4. Meutia Awani yang selalu menemani, memberi semangat dan motivasi penulis untuk fokus dan komitmen dalam penyelesaian skripsi.

Akhir kata, penulis mengucapkan terima kasih. Mohon maaf atas kekurangan dan kesalahan yang terdapat dalam penulisan ini. Semoga karya ilmiah ini bermanfaat untuk penulis dan pembaca, serta bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, 14 Juni 2024

Rachmat Ghaly



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Manfaat Penelitian	3
1.5 Ruang Lingkup Penelitian	4
II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Daun Kelor (<i>Moringa Oleifera</i>)	5
2.2 Flavonoid	5
2.2.1 Quercetin	5
2.2.2 Myricetin	6
2.2.3 Kaempferol	6
2.3 <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	7
2.3.1 Pendekatan Fungsional Kerapatan	8
2.3.2 Teorema Hohenberg-Kohn	8
2.3.3 Teorema Kohn-Sham	10
2.3.4 <i>Basis Set</i> , dan <i>Energi Exchange-Correlation</i>	11
2.4 <i>Conductor-like Polarizable Continuum Model</i> (CPCM)	12
2.4.1 Kontinum Dielektrik, Polarisabilitas Pelarut, dan <i>Conductor-like</i>	12
III METODE	14
3.1 Waktu dan Tempat	14
3.2 Alat dan Bahan	14
3.3 Prosedur Kerja	15
3.3.1 Optimasi Geometri Struktur Molekul	15
3.3.2 Tahap Analisis Mekanisme Interaksi Senyawa Antioksidan terhadap Radikal Bebas	15
3.3.3 Tahap Analisis Pengaruh Pelarut pada Aktivitas Antioksidan	17
3.3.4 Tahap Penentuan Nilai Parameter Reaktivitas Global	17
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	14
4.1 Optimasi Struktur Geometri Senyawa Quercetin, Myricetin, dan Kaempferol	14

4.2	Analisis Mekanisme Interaksi Senyawa Antioksidan terhadap Radikal Bebas	22
4.2.1	Analisis Mekanisme <i>Hidrogen Atom Transfer</i> (HAT)	22
4.2.2	Analisis Mekanisme Single Electron Transfer Followed by Proton Transfer (SET-PT)	24
4.2.3	Analisis Mekanisme Sequential Proton Loss Electron Transfer (SPLET)	27
4.3	Analisis Reaktivitas Global dari Senyawa Quercetin, Myricetin, dan Kaempferol	30
4.3.1	Energi Gap (ΔE)	34
4.3.2	<i>Electronegativity</i> (χ)	35
4.3.3	Potensial Kimia (μ)	35
4.3.4	<i>Hardness</i> (η)	36
4.3.5	<i>Softness</i> (σ)	36
4.3.6	<i>Electrophilicity</i> (ω)	37
4.3.7	<i>Nucleophilicity</i> (ϵ)	37
4.3.8	Energi Ionisasi (IE)	37
4.3.9	Afinitas Elektron (EA)	38
V	SIMPULAN DAN SARAN	39
5.1	Simpulan	39
5.2	Saran	39
	DAFTAR PUSTAKA	40
	LAMPIRAN	44
	RIWAYAT HIDUP	48

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

DAFTAR TABEL

1	Daftar kata kunci pelarut yang tersedia, konstanta dielektrik (ϵ) pelarut dan indeks bias.	13
2	Daftar kunci parameter geometri optimal pilihan pada perhitungan DFT B3LYP/def2-SVP pada fase gas dan fase pelarut air.	20
3	Nilai parameter BDE dari senyawa Quercetin, Myricetin dan Kaempferol dengan perhitungan DFT B3LYP/def2-SVP pada fase gas dan fase pelarut air.	22
4	Nilai parameter IP dari senyawa Quercetin, Myricetin dan Kaempferol dengan perhitungan DFT B3LYP/def2-SVP pada fase gas dan fase pelarut air.	25
5	Nilai parameter PA, ETE, dan PA+ETE dari senyawa Quercetin, Myricetin dan Kaempferol dengan perhitungan DFT B3LYP/def2-SVP pada fase gas dan fase pelarut air.	28
6	Nilai parameter Reaktivitas Global dari senyawa Quercetin, Myricetin dan Kaempferol dalam fase gas dan fase pelarut air.	34

DAFTAR GAMBAR

1	Struktur Kimia Quercetin ($C_{15}H_{10}O_7$)	6
2	Struktur Kimia Myricetin ($C_{15}H_{10}O_8$)	6
3	Struktur Kimia Kaempferol ($C_{15}H_{10}O_6$)	7
4	Gambar 4 Struktur 3D Molekul Senyawa (a) Quercetin ($C_{15}H_{10}O_7$); (b) Myricetin ($C_{15}H_{10}O_8$); (c) Kaempferol ($C_{15}H_{10}O_6$)	14
5	Struktur 3D geometri optimal pada fase gas dari senyawa (a) Quercetin ($C_{15}H_{10}O_7$); (b) Myricetin ($C_{15}H_{10}O_8$); (c) Kaempferol ($C_{15}H_{10}O_6$) dengan perhitungan DFT B3LYP/def2-SVP.	19
6	Struktur 3D geometri optimal pada fase pelarut air dari senyawa (a) Quercetin ($C_{15}H_{10}O_7$); (b) Myricetin ($C_{15}H_{10}O_8$); (c) Kaempferol ($C_{15}H_{10}O_6$) dengan perhitungan DFT B3LYP/def2-SVP.	20
7	Peta panas (Heatmap) sebaran nilai parameter BDE pada fase gas dan fase pelarut dari senyawa Quercetin ($C_{15}H_{10}O_7$), Myricetin ($C_{15}H_{10}O_8$), dan Kaempferol ($C_{15}H_{10}O_6$) dengan perhitungan DFT B3LYP/def2-SVP.	24
8	Peta panas (Heatmap) sebaran nilai parameter IP+PDE pada fase gas dan fase pelarut dari senyawa Quercetin ($C_{15}H_{10}O_7$), Myricetin ($C_{15}H_{10}O_8$), dan Kaempferol ($C_{15}H_{10}O_6$) dengan perhitungan DFT B3LYP/def2-SVP.	27
9	Peta panas (Heatmap) sebaran nilai parameter PA+ETE pada fase gas dan fase pelarut dari senyawa Quercetin ($C_{15}H_{10}O_7$), Myricetin ($C_{15}H_{10}O_8$), dan Kaempferol ($C_{15}H_{10}O_6$) dengan perhitungan DFT B3LYP/def2-SVP.	30
10	Kontur HOMO-LUMO Quercetin	31
11	Kontur HOMO-LUMO Myricetin	31



12	Kontur HOMO-LUMO Kaempferol.	32
13	Kontur HOMO-LUMO Quercetin pada fase pelarut air.	32
14	Kontur HOMO-LUMO Myricetin pada fase pelarut air.	32
15	Kontur HOMO-LUMO Kaempferol pada fase pelarut air.	33

DAFTAR LAMPIRAN

1	Diagram alir pelaksanaan penelitian	45
2	Perhitungan paramater entalpi dari senyawa flavonoid pada fase gas	45
3	Perhitungan paramater entalpi dari senyawa flavonoid pada fase pelarut air	46.

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :

- Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
- Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.

2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.