

Hubungan antara sifat dan struktur senyawa flavonoid dengan aktivitas antioksidannya menggunakan metode regresi multi linier (RML)

Muhammad Luthfi Attamimi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20247414&lokasi=lokal>

Abstrak

Telah dilakukan penelitian terhadap hubungan antara sifat dan struktur dengan aktivitas (HKSA) antioksidan terhadap 36 senyawa flavonoid dengan menggunakan metoda Regresi Multi Linear (RML).

Untuk menentukan HKSA dari senyawa flavonoid dilakukan proses optimasi geometri dan Perhitungan logaritma koefisien partisi (LogP), molar refractivity (MR), berat molekul (MW), diameter (D), Molecular Topological Index (Tindx), Polar Surface Area (PSAr), Perubahan Energi (PE) antara energi HOMO dengan energi LUMO sebagai sifat struktur dengan perangkat lunak ChemOffice for Windows versi 9.0. Aktivitas antioksidan senyawa flavonoid yang digambarkan melalui nilai %AA (literatur). HKSA diperoleh dari hasil perhitungan dengan menggunakan metoda Analisis Regresi Multi Linier (RML) dengan perangkat lunak Matlab sehingga diperoleh suatu persamaan yang dapat digunakan untuk mengetahui nilai aktivitas antioksidan suatu senyawa flavonoid secara perhitungan. Dari hasil percobaan diperoleh tiga persamaan HKSA terbaik untuk tiga golongan senyawa flavonoid. Yaitu:

Untuk kelompok Flavonols & Flavones,

$$AA\% = 64,87 - 0,86455 \cdot \text{LogF}^* - 0,012724 \cdot \text{PogP}^2 - 0,73385 \cdot \text{MR} + 0,00045908 \cdot \text{Koef Partisi} + 0,016951 \cdot \text{W} + 0,017316 \cdot \text{Jiam} - 0,000023175 \cdot \text{TIndx} - 34,93 \cdot \log(\text{TIndx}) + 4,5279 \cdot \log(\text{TIndx})^2 - 0,037056 \cdot \text{PSAr} + 4,2436 \cdot \text{X} \ll \text{g PSAr} + 0,005276 \cdot \text{PE}$$

Dengan $R^2 = 0,94518$; $n = 24$

Untuk kelompok Flavanones, diHydroflavanols & Biflavanones:

$$AA\% = 0,13916 \cdot \text{LogP}^2 - 0,00010645 \cdot \text{Koef Partition} + 0,0075968 \cdot \text{MW} - 0,011973 \cdot \text{Diam} - 0,00015221 \cdot \text{TIndx} + 0,0058472 \cdot \text{PSAr} + 0,26532 \cdot \text{PE}$$

Dengan $R^2 = L$; $n = 7$

Untuk kelompok isoflavones,

$$AA\% = 0,0092819 \cdot \text{Koef Partisi} + 0,0030657 \cdot \text{MW} - 0,00019976 \cdot \text{TIndx} + 0,009263 \cdot \text{PSAr}$$

Dengan $R^2 = 1$; $n = 5$