



**UJI AKTIVITAS SENYAWA KHRISIN SEBAGAI  
ANTIOKSIDAN DENGAN MODIFIKASI GUGUS  
PADA CINCIN AKTIFNYA MENGGUNAKAN  
METODE RM1 DAN AB INITIO**

Skripsi

Disajikan sebagai salah satu syarat  
untuk memperoleh gelar Sarjana Sains  
Program Studi Kimia

oleh

Fadhlina Khoirun Nisa

4311409009

**JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG  
2013**

## PERNYATAAN

Saya menyatakan bahwa skripsi ini bebas plagiat, dan apabila di kemudian hari terbukti terdapat plagiat dalam skripsi ini, maka saya bersedia menerima sanksi sesuai ketentuan peraturan perundang – undangan.



Semarang, 27 Agustus 2013

Fadhlina Khoirun Nisa  
4311409009

## PERSETUJUAN PEMBIMBING

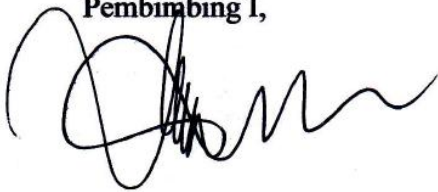
Skripsi ini telah disetujui oleh pembimbing untuk diajukan ke Sidang Panitia Ujian Skripsi Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang.

Disetujui pada :

Hari : Senin / Agustus

Tanggal : 19 Agustus 2013

Pembimbing I,



Drs. Kasmui, M.Si  
NIP. 196602271991021001

Pembimbing II,



Harjito, S.Pd, M.Sc  
NIP. 197206232005011001

## PENGESAHAN

Skripsi yang berjudul

Uji Aktivitas Senyawa Khrisin sebagai Antioksidan dengan Modifikasi  
Gugus pada Cincin Aktifnya Menggunakan Metode RM1 dan Ab Initio

disusun oleh

Fadhlina Khoirun Nisa

4311409009

telah dipertahankan di hadapan sidang Panitia Ujian Skripsi FMIPA UNNES pada  
tanggal 27 Agustus 2013.

Panitia :



Prof. Dr. Wiyanto, M.Si  
NIP. 196310121988031001

Sekretaris



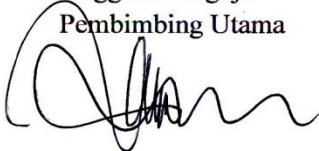
Dra. Woro Sumarni, M.Si  
NIP. 196507231993032001

Ketua Penguji



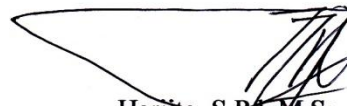
Agung Tri Prasetya, S.Si, M.Si  
NIP. 196904041994021001

Anggota Penguji/  
Pembimbing Utama



Drs. Kasmui, M.Si  
NIP. 196602271991021001

Anggota Penguji/  
Pembimbing Pendamping



Harjito, S.Pd, M.Sc  
NIP. 197206232005011001

## MOTTO DAN PERSEMBAHAN

Motto :

- Tidak ada masalah yang tidak bisa diselesaikan selama ada komitmen bersama untuk menyelesaikannya.
- “ Barang siapa bersungguh-sungguh, sesungguhnya kesungguhannya itu adalah untuk dirinya sendiri “ (QS. Al Ankabut : 6).
- “ Sesungguhnya Allah tidak akan mengubah nasib suatu kaum hingga mereka mengubah diri mereka sendiri “ (QS. Ar-Ra’d : 11)

Persembahan :

Karya tulis yang sederhana ini saya persembahkan kepada :

- ☞ Ayahanda dan Ibunda, yang selalu mengagungkan nama Allah SWT di setiap malam untuk mendoakan penulis.
- ☞ Kedua kakak lelakiku, terima kasih atas kasih sayangnya selama ini dan sudah menjadi kakak terbaik yang pernah ada
- ☞ Kedua adikku, terima kasih sudah menjadi adik terbaik yang pernah ada.

## KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT yang telah memberikan rahmat, taufik, dan hidayah-Nya kepada penulis, sehingga penulis dapat menyelesaikan penyusunan skripsi yang berjudul “ UJI AKTIVITAS SEYAWA KHRISIN SEBAGAI ANTIOKSIDAN DENGAN MODIFIKASI GUGUS PADA CINCIN AKTIFNYA MENGGUNAKAN METODE RM1 DAN AB INITIO “. Penulisan skripsi ini dapat terselesaikan tidak lepas dari bantuan dan dukungan berbagai pihak. Pada kesempatan ini penulis menyampaikan terima kasih yang setulusnya kepada :

1. Rektor Universitas Negeri Semarang
2. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Semarang
3. Ketua Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Semarang
4. Kepala Laboratorium Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang
5. Bapak Drs. Kasmui, M.Si. selaku dosen pembimbing I yang telah memberikan ilmu, arahan, dan bimbingan dalam penelitian dan penulisan skripsi
6. Bapak Harjito, S.Pd, M.Sc. selaku dosen pembimbing II yang telah memberikan ilmu, arahan, dan bimbingan dalam penelitian dan penulisan skripsi
7. Bapak Agung Tri Prasetya, S.Si, M.Si selaku dosen penguji utama yang telah memberikan saran dan masukan dalam penulisan skripsi

8. Ayahanda Sudibyo dan Ibunda Dra. Zuraidah Sri Utami yang telah begitu kesulitan di atas kesulitan dalam membiayai, membimbing, serta tidak pernah luput menyebut nama penulis dalam setiap sujud serta doanya agar dapat segera menyelesaikan studinya
9. Kedua kakakku Wawan dan Fahmi, serta kedua adikku Afdil dan Ama yang telah memberikan doa dan kasih yang tulus kepada penulis
10. Ida, Arum, Titul, Mas Ut, Aziz, Natan, Eka, dan Sinta atas segala bantuan yang telah diberikan selama penelitian dan penulisan skripsi
11. Nana, Tika, Tri, Ita yang telah membantu kelancaran penyelesaian skripsi
12. Teman-teman Kimia angkatan 2009 dan Wisma Rizkia 1
13. Serta semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu per satu, yang telah membantu dalam penelitian dan penyusunan skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa karya ilmiah ini masih jauh dari sempurna, oleh karena itu kritik dan saran yang bersifat membangun sangat penulis harapkan untuk kesempurnaan di masa yang akan datang.

Akhir kata, semoga karya ilmiah ini dapat bermanfaat bagi civitas akademika dan pihak yang berkepentingan. Tidak lupa penulis mohon maaf atas segala kesalahan yang mungkin terdapat di dalamnya.

Semarang, 27 Agustus 2013

Penulis

## ABSTRAK

Nisa, F.K. 2013. Uji Aktivitas Senyawa Khrisin Sebagai Antioksidan Dengan Modifikasi Gugus Pada Cincin Aktifnya Menggunakan Metode RM1 dan Ab Initio. Skripsi, Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang. Pembimbing Utama Drs. Kasmui, M.Si. dan Pembimbing Pendamping Harjito, S.Pd, M.Sc.

Kata kunci : antioksidan, flavonoid, modifikasi khrisin, deskriptor, HKSA

Gaya hidup, lingkungan tercemar dan pola makan serta kebiasaan-kebiasaan yang berlaku pada masyarakat saat ini mampu merangsang tumbuhnya radikal bebas yang dapat merusak tubuh kita. Upaya untuk mencegah atau mengurangi timbulnya penyakit degeneratif yang ditimbulkan oleh aktivitas radikal bebas adalah dengan mengkonsumsi makanan yang mengandung antioksidan. Flavonoid termasuk senyawa fenolik alam yang potensial sebagai antioksidan dan mempunyai bioaktivitas sebagai obat. Khrisin dan hesperitin merupakan senyawa flavonoid yang memiliki aktivitas antioksidan. Berdasarkan penelitian-penelitian terdahulu didapatkan bahwa senyawa khrisin memiliki aktivitas antioksidan lebih rendah dari pada hesperitin. Oleh karena itu perlu adanya modifikasi senyawa khrisin agar diperoleh senyawa baru yang memiliki aktivitas antioksidan yang lebih tinggi dari hesperitin. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui apakah senyawa modifikasi dari khrisin memenuhi aktivitas antioksidan yang lebih baik dari hesperitin dan faktor apa saja yang mempengaruhi aktivitas antioksidan. Deskriptor molekuler dari senyawa turunan flavon/flavonol, modifikasi senyawa khrisin, dan hesperitin telah dibuat dengan bantuan perhitungan RM1 dan Ab Initio, dan optimasi geometri menggunakan *software Hyperchem 8.0.7*. Analisis korelasi antara variabel bebas dan variabel terikat dilakukan menggunakan program SPSS® *for Windows* versi 16.0. Hasil korelasi menunjukkan bahwa parameter momen dipol merupakan variabel yang paling berpengaruh terhadap aktivitas antioksidan. Analisis regresi multilinier dilakukan dengan menggunakan program SPSS yang sama. Momen dipol ( $\mu$ ), energi ikat ( $E_b$ ), dan energi elektronik ( $E_e$ ) digunakan untuk analisis HKSA. Hasilnya sangat memuaskan karena memiliki nilai R dan  $R^2$  tertinggi, yaitu nilai R sebesar 0,924 dan  $R^2$  sebesar 0,854. Aktivitas antioksidan prediksi dihitung menggunakan *Multiple Regression Calculator*. Aktivitas antioksidan dapat meningkat dengan penambahan gugus yang bersifat basa dan memiliki keelektronegatifan tinggi, tetapi akan menurunkan aktivitas antioksidan dengan penambahan gugus yang memiliki lebih banyak karbon dan keruahan molekul tinggi. Modifikasi senyawa khrisin yang memiliki aktivitas antioksidan prediksi lebih tinggi dari pada senyawa hesperitin yaitu : senyawa 5,7,3-dihidroksi flavon (galagin) dan 5,7,8-dihidroksi flavon, dengan nilai aktivitas antioksidan prediksi sebesar -1,6887 dan -1,8284.



## ABSTRACT

Nisa, F.K. 2013. Chrysin Activity As Antioxidant With Modification Of Groups On The Ring Active Using The Method Of RM1 And Ab Initi. Skripsi, Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang. Pembimbing Utama Drs. Kasmui, M.Si. dan Pembimbing Pendamping Harjito, S.Pd, M.Sc.

Keywords: antioxidants, flavonoids, modification khrisin, descriptors, QSAR

Lifestyle, polluted environment and eating patterns prevailing in today's society is able to stimulate the growth of free radicals that can damage our bodies. Efforts to prevent or reduce the incidence of degenerative diseases caused by free radical activity is to consume foods that contain antioxidants. Flavonoids including potential natural phenolic compounds as antioxidants and have bioactivity as medicine. Chrysin and hesperitin are flavonoid compounds that has antioxidant activity. Based on previous studies found that chrysin compound has lower antioxidant activity than hesperitin. Therefore needs to modify chrysin compounds in order to obtain new compounds that have a higher antioxidant activity than hesperitin. This study aim to know if modification of chrysin compounds meets better antioxidant activity than hesperitin and any factor affect the antioxidant activity. From the molecular descriptors derived compounds flavone / flavonols, compounds khrisin modification, and hesperitin calculations have been made with the help of RM1, ab initio, and geometry optimization using Hyperchem software 8.0.7. Analysis of the correlation between the independent variables and the dependent variable performed using SPSS ® for Windows version 16.0. Result of correlation showed that parameters of dipole moment is the variable that most influence on antioxidant activity. Multilinear regression analysis performed using SPSS same. Dipole moment ( $\mu$ ), binding energy ( $E_b$ ), and electronic energies ( $E_e$ ) used for QSAR analysis. The results very satisfying because it has the highest value of R and  $R^2$ , the R value of 0.924 and  $R^2$  of 0.854. The antioxidant prediction activity was calculated using multiple regression calculator. Antioxidant activity can be increase by the addition of basic groups and has a high electronegativity, but decrease with addition antioxidant activity of group has more carbon and high-abundance molecules. Modification of chrysin compounds that has antioxidant activity prediction is higher than the hesperitin compound i.e. : flavones compound of 5,7,3-dihydroxy (galagin) and 5,7,8-dihydroxy flavones, with predictive value of antioxidant activity for -1.6887 and - 1.8284.

# DAFTAR ISI

	Halaman
PRAKATA.....	vi
ABSTRAK.....	viii
ABSTRACT.....	ix
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR GAMBAR.....	xiv
DAFTAR LAMPIRAN.....	xv
<b>BAB</b>	
1. PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang Masalah.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	5
1.3 Tujuan.....	6
1.4 Manfaat Penelitian.....	6
2. TIJAUAN PUSTAKA.....	7
2.1 Antioksidan.....	7
2.2 Flavonoid.....	9
2.2.1 Klasifikasi Flavonoid.....	9
2.2.2 Peranan Flavonoid.....	11
2.3 Senyawa Hesperitin.....	13
2.4 Senyawa Khrisin.....	14
2.5 Substitusi Gugus.....	15
2.6 Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA).....	17
2.7 Analisis Statistik dalam HKSA.....	18
2.7.1 Korelasi antar variabel.....	19
2.7.2 Analisa regresi multilinier.....	19
2.8 Deskriptor HKSA.....	21
2.9 Recife Model 1 (RM1).....	22
2.10 Ab Initio.....	24

2.11	Pemodelan Molekul .....	24
2.12	Optimasi Geometri .....	25
3.	METODE PENELITIAN.....	27
3.1	Lokasi Penelitian .....	27
3.2	Variabel Penelitian .....	27
3.2.1	Variabel Bebas .....	27
3.2.2	Variabel Terikat .....	27
3.3	Alat-alat yang digunakan.....	27
3.3.1	Perangkat Keras .....	27
3.3.2	Perangkat Lunak.....	28
3.4	Materi Penelitian.....	28
3.5	Prosedur Penelitian .....	30
3.5.1	Pemodelan Molekul .....	30
3.5.2	Optimasi Geometri .....	31
3.5.2.1	Metode Recife Model 1 (RM1).....	31
3.5.2.2	Metode Ab Initio .....	31
3.6	Analisis Data.....	33
3.6.1	Analisis statistik kajian HKSA.....	33
3.6.1.1	Analisis korelasi .....	33
3.6.1.2	Analisis regresi multilinier .....	33
3.6.2	Menghitung nilai prediksi aktivitas antioksidan .....	34
4.	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN .....	35
4.1	Hasil optimasi .....	35
4.2	Analisis statistik kajian HKSA .....	39
4.2.1	Korelasi antar variabel .....	39
4.2.2	Analisis regresi multilinier .....	40
4.3	Nilai prediksi aktivitas antioksidan .....	43
5.	PENUTUP.....	52
5.1	Simpulan.....	53
5.2	Saran .....	54
	DAFTAR PUSTAKA .....	55
	LAMPIRAN.....	59

## DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
2.1 Aktivitas antioksidan senyawa flavonoid hasil penelitian (Liu dkk ,2010)	12
2.2 Aktivitas antioksidan senyawa flavonoid hasil penelitian (Ray, 2012)..	13
2.3 Koefisien korelasi .....	19
3.1 Aktivitas antioksidan dari senyawa flavon dan flavonol hasil penelitian Ray (2012) .....	29
3.2 Aktivitas antioksidan dari senyawa flavanon dan dihidroflavonol.....	29
4.1 Energi total senyawa turunan flavon/flavonol hasil optimasi menggunakan metode RM1 .....	35
4.2 Energi total senyawa modifikasi khrisin hasil optimasi menggunakan metode RM1.....	36
4.3 Energi total senyawa modifikasi khrisin hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G.....	36
4.4 Energi total senyawa modifikasi khrisin hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G .....	37
4.5 Nilai korelasi antara variabel bebas dengan aktivitas antioksidan .....	39
4.6 Model persamaan HKSA hasil analisis regresi multilinier .....	41
4.7 Harga polarisabilitas dan refraktivitas modifikasi khrisin dengan gugus metoksi hasil optimasi menggunakan metode RM1 .....	43
4.8 Nilai prediksi antioksidan senyawa turunan flavon dan flavonol dengan menggunakan metode RM1 .....	44
4.9 Aktivitas antioksidan senyawa turunan flavon/flavonol dengan menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G.....	44
4.10 Nilai aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan gugus metoksi dengan metode RM1 .....	45
4.11 Nilai aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan berbagai gugus alkoksi hasil optimasi metode RM1 .....	46

4.12	Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan berbagai gugus alkoksi hasil optimasi ab initio dengan basis set 6-31G .....	47
4.13	Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan hidroksi hasil optimasi metode RM1 .....	48
4.14	Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan amina hasil optimasi metode RM1 .....	48
4.15	Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan OH dan NH <sub>2</sub> hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G .	48
4.16	Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan fluor hasil optimasi menggunakan metode RM1 .....	49
4.17	Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan klor hasil optimasi menggunakan metode RM1 .....	49
4.18	Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan fluor dan klor hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G .	50
4.19	Aktivitas antioksidan prediksi senyawa turunan flavanon hasil optimasi meggunakan RM1 .....	51
4.20	Aktivitas antioksidan prediksi senyawa turunan flavanon hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G.....	51

## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Mekanisme reaksi antara galagin dan radikal bebas (Amic, dkk 2003)...	8
2.2 Struktur dasar senyawa flavonoid, isoflavonoid, neoflavonoid .....	9
2.3 Struktur flavon dan flavonol.....	10
2.4 Struktur flavanon dan flavanonol .....	11
2.5 Struktur hesperitin 3D dan 2D.....	14
2.6 Struktur khresin 3D dan 2D .....	14
2.7 Struktur senyawa flavonoid .....	16
3.1 Struktur flavon dan flavonol.....	28
3.2 Struktur flavanon dan dihidroflavonol .....	29
3.3 Diagram alur pemodelan molekul dan optimasi geometri menggunakan metode RM1 .....	31
3.4 Diagram alur pemodelan molekul dan optimasi geometri menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G .....	32
3.5 Diagram alur analisis regresi multilinear .....	33
3.6 Diagram alur analisis aktivitas antioksidan prediksi .....	34
3.7 Multiple regression calculator .....	34
4.1 Panjang ikatan ( $\text{\AA}$ ) antar atom dalam struktur khresin sebelum dioptimasi geometri. ....	37
4.2 Panjang ikatan ( $\text{\AA}$ ) antar atom dalam struktur khresin setelah dioptimasi dengan metode semiempiris RM1 .....	38
4.3 Panjang ikatan ( $\text{\AA}$ ) antar atom dalam struktur khresin setelah dioptimasi dengan metode Ab Initio dengan basis set 6-3G .....	38

## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
1. Prediksi struktur modifikasi senyawa khrisin .....	59
2. Hasil perhitungan optimasi geometri .....	61
a. Hasil optimasi geometri senyawa modifikasi khrisin menggunakan metode RM1 .....	61
b. Hasil optimasi geomteri senyawa modifikasi khrisin menggunakan metode Ab Initio dengan basis set 6-31G.....	65
3. Output hasil optimasi geometri .....	68
a. Optimasi menggunakan metode RM1 .....	68
1) Senyawa turunan flavon/flavonol .....	68
2) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus alkoksi .....	73
3) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus OH dan NH <sub>2</sub> .....	80
4) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus fluor dan klor.....	86
5) Senyawa hesperitin .....	93
b. Optimasi menggunakan metode Ab Initio dengan basis set 6-31G.	93
1) Senyawa turunan flavon/flavonol .....	93
2) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus alkoksi .....	103
3) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus OH dan NH <sub>2</sub> .....	113
4) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugua fluor dan klor .....	116
5) Senyawa hesperitin .....	120
4. Analisis korelasi antar variabel .....	121
5. Analisis regresi multilinier .....	122
6. Perhitungan aktivitas antioksidan .....	164

# **BAB 1**

## **PENDAHULUAN**

### **1.1 Latar Belakang Masalah**

Gaya hidup, lingkungan tercemar dan pola makan serta kebiasaan-kebiasaan yang berlaku pada masyarakat saat ini mampu merangsang tumbuhnya radikal bebas yang dapat merusak tubuh kita. Kebiasaan mengkonsumsi makanan yang digoreng, berkadar lemak tinggi, kolesterol tinggi, dan berserat rendah dapat menimbulkan penyakit jantung koroner, kanker payudara, prostat, pankreas, kolon, dan endometrium, sebaliknya peningkatan resiko terkena penyakit hipertensi, stroke, dan kanker perut berkaitan dengan konsumsi yang tinggi terhadap makanan asin, dan makanan yang proses pembuatannya menggunakan asap. Berbagai penyakit tersebut disebabkan oleh radikal bebas. Meningkatnya penggunaan kendaraan bermotor dewasa ini menyebabkan polusi udara juga semakin meningkat. Udara yang telah tercemar dengan asap kendaraan bermotor saat kita hirup akan mengakibatkan terbentuknya radikal bebas didalam tubuh. Sinar ultra violet dan asap rokok juga dapat menyebabkan terbentuknya radikal bebas. Steinberg (2009) menyatakan bahwa radikal bebas merupakan salah satu penyebab timbulnya penyakit degeneratif antara lain kanker, aterosklerosis, stroke, rematik dan jantung.

Upaya untuk mencegah atau mengurangi timbulnya penyakit degeneratif yang ditimbulkan oleh aktivitas radikal bebas adalah dengan mengkonsumsi



makanan yang mengandung antioksidan. Antioksidan adalah zat yang dapat menunda dan mencegah terjadinya reaksi antioksidasi radikal bebas dalam oksidasi lipid (Kochhar dan Rossel, 1990). Berdasarkan sumbernya antioksidan dibagi dalam dua kelompok, yaitu antioksidan sintetis dan antioksidan alami. Antioksidan sintetis misalnya butil hidroksi anisol (BHA), butil hidroksi toluena (BHT) dan propil galat (PG) (Pratt, 1992). Ada banyak bahan pangan yang dapat menjadi sumber antioksidan alami, misalnya rempah-rempah, teh, coklat, sayur-sayuran, enzim dan protein. Kebanyakan sumber antioksidan alami adalah tumbuhan dan umumnya merupakan senyawa fenolik yang tersebar di seluruh bagian tumbuhan baik di kayu, biji, daun, buah, akar, bunga maupun serbuk sari (Sarastani dkk, 2002).

Flavonoid termasuk senyawa fenolik alam yang potensial sebagai antioksidan dan mempunyai bioaktivitas sebagai obat. Senyawa-senyawa ini dapat ditemukan pada batang, daun, bunga, dan buah. Manfaat flavonoid antara lain adalah untuk melindungi struktur sel, meningkatkan efektivitas vitamin C, anti-inflamasi, mencegah keropos tulang dan sebagai antibiotik (Waji dan Sugrani, 2009). Dalam tubuh manusia flavonoid berfungsi sebagai antioksidan sehingga sangat baik untuk pencegahan kanker. Golongan flavonoid yang memiliki aktivitas antioksidan meliputi flavon, flavonol, isoflavon dan flavanon (Trilaksani, 2003).

Aktivitas antioksidan senyawa flavonoid telah diteliti oleh peneliti terdahulu. Julia (2008) telah mengkaji 26 senyawa turunan flavonoid dengan menggunakan deskriptor molekular yang dihitung dengan menggunakan metode

semiempirik AM1 dengan pengolahan statistik menggunakan PCA dan PCR. Aktivitas antioksidan yang diperoleh khrisin yaitu 0,28 % dan yang diperoleh hesperitin yaitu 3,08 % . Liu dkk (2010) telah melakukan isolasi 7 senyawa flavonoid dari *Halostachys caspica* C.A.Mey (*Chenopodiaceae*) melalui analisis fisikokimia dan spektrofotometri. Aktivitas antioksidan khrisin yang dihasilkan yaitu 36,67  $\mu\text{g/mL}$ . Hasil tersebut masih relatif rendah dari pada senyawa flavonoid lainnya.

Azra (2008) telah melakukan penelitian untuk menentukan dan menganalisis hubungan kuantitatif antara struktur dengan aktivitas antioksidan dari satu seri senyawa turunan flavonoid. Dalam penelitian ini, optimasi geometri struktur dilakukan dengan metode MM+ (dengan batas konvergensi 0,005 kkal/A) dan metode AM1 (dengan batas konvergensi 0,001 kkal/A). Aktivitas antioksidan senyawa khrisin yang diperoleh yaitu -17,69 dan aktivitas antioksidan senyawa hesperitin yang diperoleh yaitu 4,50. Ray (2012) telah melakukan penelitian aktivitas antioksidan senyawa turunan flavonoid menggunakan DPPH. Aktivitas antioksidan senyawa khrisin yang diperoleh yaitu -2,692 dan aktivitas antioksidan senyawa hesperitin yang diperoleh yaitu -1,885. Berdasarkan penelitian-penelitian terdahulu didapatkan bahwa senyawa khrisin memiliki aktivitas antioksidan lebih rendah dari pada hesperitin.

Hesperitin adalah senyawa flavanon yang ditemukan berlimpah dalam buah jeruk. Senyawa ini diperoleh dengan menghidrolisis hesperidin menggunakan asam sulfat (Swathi dkk, 2012) dan isolasi dari buah jeruk. Hesperitin memiliki sifat antioksidan dan anti-inflamasi. Aktivitas antioksidan

senyawa hesperitin lebih tinggi dibandingkan dengan khrisin dan paling tinggi diantara derivat flavanon yang lain. Namun senyawa hesperetin sukar disintesis. Khrisin merupakan salah satu senyawa turunan flavanon yang mudah disintesis dengan floroglusinol (Utami, 2012). Senyawa khrisin banyak terdapat pada madu dan *parsley*, serta banyak dimanfaatkan untuk produk-produk kosmetik.

Oleh karena itu perlu adanya modifikasi senyawa khrisin agar diperoleh senyawa baru yang memiliki aktivitas antioksidan yang lebih tinggi dari hesperitin. Penentuan senyawa flavonoid dengan aktivitas antioksidan terbaik merupakan suatu penelitian yang cukup memakan waktu dan biaya. Salah satu pemanfaatan metode analisis kuantitatif struktur-aktivitas (HKSA) adalah pengembangan senyawa antioksidan. HKSA merupakan hubungan antara struktur kimia dengan aktivitas biologis, yang diterjemahkan kedalam bentuk persamaan matematika antara struktur kimia yang dideskripsikan oleh deskriptor dengan aktivitas tersebut. Hubungan ini diperoleh dengan menggunakan perangkat lunak statistik untuk mendapatkan kombinasi yang linier dari aktivitas dengan deskriptor, sehingga dapat digunakan untuk memprediksi aktivitasnya (Rozaq, 2008).

Dalam penelitian ini akan dicoba melakukan modifikasi senyawa khrisin dengan mengganti salah satu gugus H dengan gugus alkoksi, hidroksi, amina, fluor dan klor. Gugus alkoksi yang di gunakan yaitu : etoksi, metoksi, propoksi, isopropoksi, t-butoksi. Berbagai gugus alkoksi dipilih untuk mengetahui pengaruh panjang rantai karbon yang ditambahkan dan keruahan struktur terhadap aktivitas antioksidan. Gugus alkoksi dan hidroksi merupakan gugus pendonor elektron dan

pengaktivasi cincin. Substituen pendonor elektron mampu meningkatkan aktivitas antioksidan sedangkan gugus penarik elektron akan menurunkan aktivitasnya sebagai antioksidan (O'Malley, 2002 dalam Aini dkk, 2006). Gugus amina dan hidroksi merupakan gugus yang bersifat basa. Gugus tersebut dipilih untuk mengetahui tingkat kebasaaan terhadap aktivitas antioksidan. Gugus fluor dan klor dipilih untuk mengetahui pengaruh keelektronegatifan terhadap aktivitas antioksidan.

Berdasarkan penggantian gugus tersebut diharapkan dapat mengetahui beberapa peparuh yang dapat meningkatkan aktivitas antioksidan. Senyawa yang baru hasil modifikasi diharapkan dapat memiliki aktivitas antioksidan lebih tinggi dari senyawa hesperitin. Senyawa baru yang terbentuk akan dianalisis aktivitas antioksidannya dengan analisis HKSA menggunakan deskriptor molekuler yang dihitung menggunakan metode semiempirik *Recife Model 1* (RM1) dan *Ab Initio* dengan basis set 6-31G.

## **1.2 Rumusan Masalah**

Berdasarkan uraian dalam latar belakang, rumusan masalah pada penelitian ini adalah :

- (1) Bagaimana hubungan antara deskriptor molekuler dengan aktivitas antioksidan?
- (2) Posisi manakah yang dapat meningkatkan aktivitas antioksidan?
- (3) Apa saja yang dapat mempengaruhi aktivitas antioksidan?
- (4) Apakah senyawa modifikasi dari khrisin memenuhi aktivitas antioksidan yang lebih baik dari hesperitin?

### **1.3 Tujuan**

Tujuan penelitian ini adalah :

- (1) Untuk mengetahui bagaimana hubungan antara deskriptor molekuler dengan aktivitas antioksidan.
- (2) Untuk mengetahui posisi yang dapat meningkatkan aktivitas antioksidan.
- (3) Untuk mengetahui faktor yang dapat mempengaruhi aktivitas antioksidan.
- (4) Untuk mengetahui apakah senyawa modifikasi dari khrisin memenuhi aktivitas antioksidan yang lebih baik dari hesperitin?

### **1.4 Manfaat Penelitian**

Dari penelitian ini diharapkan :

1. Mendapatkan informasi tentang faktor-faktor yang dapat mempengaruhi aktivitas antioksidan.
2. Mendapatkan informasi senyawa turunan flavonoid baru yang memiliki aktivitas antioksidan lebih tinggi dari pada senyawa hesperitin.

## **BAB 2**

### **TINJAUAN PUSTAKA**

#### **2.1 Antioksidan**

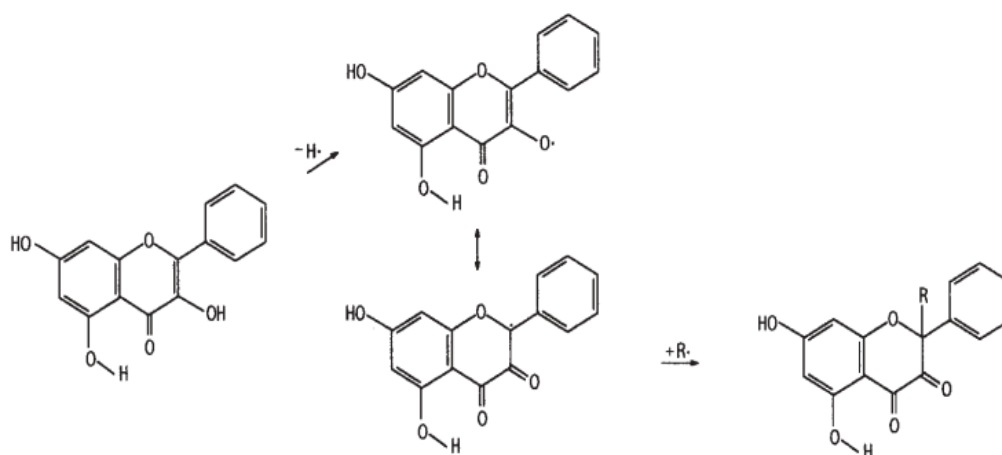
Antioksidan didefinisikan sebagai senyawa yang dapat menunda, memperlambat, dan mencegah proses oksidasi lipid. Dalam arti khusus, antioksidan adalah zat yang dapat menunda atau mencegah terjadinya reaksi antioksidasi radikal bebas dalam oksidasi lipid (Kochhar dan Rossell, 1990). Nawar (1985) dan Puspita-Nienaber dkk (1997) yang di kutip dalam Aini dkk (2006) berpendapat bahwa antioksidan menghambat pembentukan radikal bebas dengan bertindak sebagai donor H terhadap radikal bebas sehingga radikal bebas berubah menjadi bentuk yang lebih stabil. Menurut O'Malley, sebagaimana dikutip oleh Aini dkk (2006), mekanisme antioksidan erat hubungannya dengan proses transfer atom hidrogen dari gugus fenolik senyawa antioksidan ke substrat. O'Malley juga menyatakan bahwa substituen pendonor elektron mampu meningkatkan aktivitas antioksidan sedangkan gugus penarik elektron akan menurunkan aktivitas antioksidan.

Senyawa antioksidan adalah senyawa yang berperan untuk menghambat proses autooksidasi dalam minyak atau lemak (Ketaren, 1986). Antioksidan hanya berfungsi sebagai penghambat reaksi oksidasi dan tidak dapat menghentikan sama sekali proses autooksidasi. Kerja antioksidan dalam reaksi oksidasi adalah menghambat terbentuknya radikal bebas pada tahap inisiasi atau menghambat

kelanjutan reaksi berantai pada tahap propagasi dari reaksi autooksidasi (Tarigan, 2009).

Berdasarkan sumbernya antioksidan dibagi dalam dua kelompok, yaitu antioksidan sintetis (antioksidan yang diperoleh dari hasil sintesis reaksi kimia) dan antioksidan alami (antioksidan hasil ekstraksi bahan alami). Antioksidan sintetis misalnya butil hidroksi anisol (BHA), butil hidroksi toluena (BHT) dan propil galat (PG) (Pratt, 1992). Ada banyak bahan pangan yang dapat menjadi sumber antioksidan alami, misalnya rempah-rempah, teh, coklat, sayur-sayuran, enzim dan protein. Kebanyakan sumber antioksidan alami adalah tumbuhan dan umumnya merupakan senyawa fenolik yang tersebar di seluruh bagian tumbuhan baik di kayu, biji, daun, buah, akar, bunga maupun serbuk sari (Sarastani dkk, 2002).

Flavonoid merupakan senyawa polifenol yang banyak terdapat pada buah-buahan dan sayur-sayuran. Mekanisme reaksi antara senyawa flavonoid dengan radikal bebas dapat dilihat pada gambar di bawah ini :



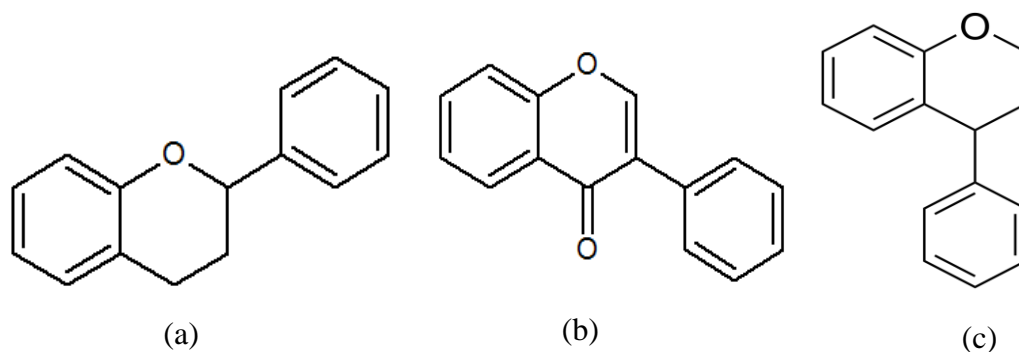
Gambar 2.1 Mekanisme reaksi antara galagin dan radikal bebas (Amic dkk, 2003)

## 2.2 Flavonoid

### 2.2.1 Klasifikasi Flavonoid

Flavonoid adalah suatu kelompok senyawa fenol terbesar yang ditemukan di alam, terutama dalam buah dan sayuran. Senyawa-senyawa ini merupakan zat warna merah, ungu, dan biru, dan sebagian zat warna kuning yang ditemukan dalam tumbuh-tumbuhan (Achmad, 1986). Flavonoid merupakan turunan fenol yang memiliki struktur dasar fenilbenzopiron (tokoferol), dicirikan oleh kerangka 15 karbon ( $C_6-C_3-C_6$ ) yang terdiri dari satu cincin teroksigenasi dan dua cincin aromatis.

Flavonoid mempunyai kerangka dasar karbon yang terdiri dari 15 atom karbon, dimana dua cincin benzen ( $C_6$ ) terikat pada suatu rantai propan ( $C_3$ ) sehingga membentuk suatu susunan  $C_6-C_3-C_6$ . Susunan ini dapat menghasilkan tiga jenis struktur, yakni 1,3-diarilpropan atau flavonoid, 1,2-diarilpropan atau isoflavonoid, dan 1,1-diarilpropan atau neoflavonoid (Achmad, 1986). Struktur dasar senyawa flavonoid, isoflavonoid, dan neoflavonoid ditunjukkan pada Gambar 2.2.



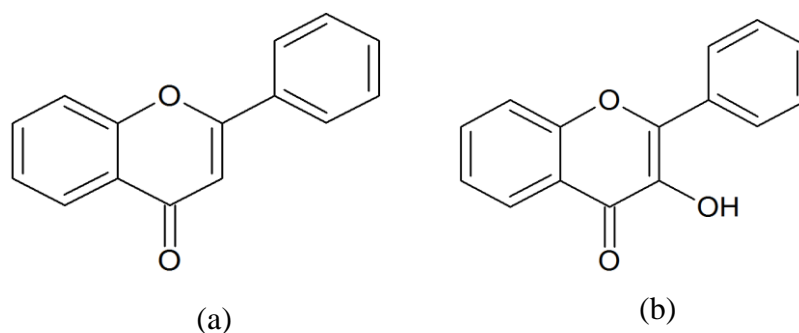
Gambar 2.2. Struktur dasar senyawa (a) flavonoid, (b) isoflavonoid, (c) neoflavonoid



Klasifikasi flavonoid sangat beragam, diantaranya ada yang mengklasifikasikan flavonoid menjadi flavon, flavonol, flavanon, isoflavon, antosianin, dan kalkon. Kebanyakan flavonoid berbentuk monomer, tetapi ada pula yang berbentuk dimer (biflavonoid), trimer, tetramer, dan polimer (Achmad, 1986). Flavonoid mempunyai sejumlah gugus hidroksil atau suatu gula sehingga merupakan suatu polar dan larut dalam pelarut-pelarut polar, seperti etanol, metanol, butanol, aseton, air, dan lain-lain (Harborne, 1987). Menurut Robinson (1995), senyawa flavonoid dapat dibedakan menjadi : flavon dan flavonol, isoflavon, flavanon dan flavonol, antosianin, auron dan kalkon. Pada penelitian ini hanya menggunakan senyawa khrisin yang merupakan senyawa turunan flavon dan hesperitin yang merupakan senyawa turunan flavanon.

a. Flavon dan Flavonol

Flavon dan flavonol merupakan pigmen berwarna kuning yang tersebar secara luas pada tumbuhan tinggi (Robinson, 1995; Tyler dkk, 1976). Flavon sering terdapat sebagai glikosida. Aglikon flavonol yang umum, yaitu : kaemferol, quercetin dan mirisetin. Struktur flavon dan flavonol disajikan pada Gambar 2.3.



Gambar 2.3 Struktur (a) flavon dan (b) flavonol



kanker (Waji dan Sugrani, 2009). Golongan flavonoid yang memiliki aktivitas antioksidan meliputi flavon, flavonol, isoflavon dan flavanon (Trilaksani, 2003). Flavonoid berperan sebagai antioksidan dengan cara menginduksi aktivitas enzim nitrit oksida (Huk dkk, 1998). Shutenko dkk (1999) menyatakan bahwa komponen antioksidan flavonoid yang tinggi didalam tubuh akan menangkap radikal bebas, sehingga radikal bebas tidak sempat bereaksi dengan nitrit oksida.

Keragaman struktur flavonoid memungkinkan turunan senyawa flavonoid berperan sebagai antioksidan, antibakteri, antiinflamasi, atimutagenik, dan antialergi (Ray, 2012). Khrisin dan hesperitin merupakan senyawa turunan flavanoid yang berperan sebagai anti inflamasi dan antioksidan juga. Antioksidan senyawa flavonoid telah diteliti oleh peneliti terdahulu. Julia (2008) telah meneliti aktivitas antioksidan turuan flavonoid menggunakan metode AM1. Persentase aktivitas antioksidan yang diperoleh yaitu : senyawa kaemferol sebesar 55,29 %; kaemfride sebesar 53,77 %; daidzein sebesar 31,96 %; hesperitin 3,08 %; dan khrisin 0,28 %.

Liu dkk (2010) telah meneliti aktivitas antioksidan senyawa flavonoid dari *Halostachys caspia* dengan DPPH. Hasil yang diperoleh disajikan pada Tabel 2.1.

Tabel 2.1 Aktivitas antioksidan senyawa flavonoid hasil penelitian (Liu dkk, 2010)

Senyawa	IC <sub>50</sub> (µg/mL)			
	Luteolin	Khrisin	Quercetin	isorhamentin-3-O-β-D-rutinoside
DPPH inhibition	25,75	36,67	2,23	177,91
β-Carotene bleaching	67,66	38,23	14,01	210,62

Azra (2008) telah melakukan penelitian untuk menentukan aktivitas antioksidan dari satu seri senyawa turunan flavonoid menggunakan metode MM+ dan metode AM1. Hasil aktivitas antioksidan yang diperoleh yaitu : senyawa kaemferol sebesar 68,08 %; flavonol 59,49 %; flavon 4,41 %; hesperitin 4,50 %; dan khrisin -17,69 %.

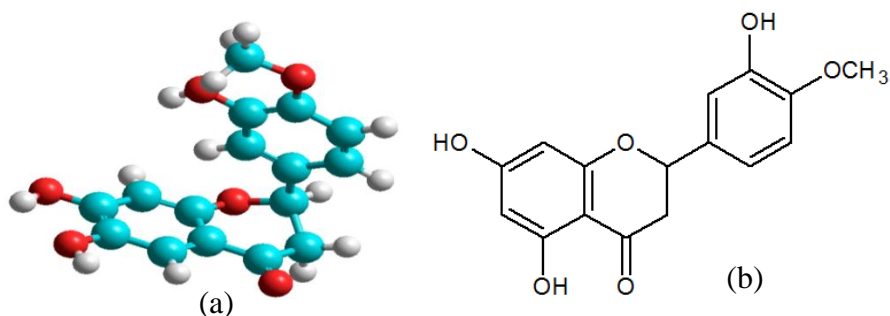
Ray (2012) telah melakukan penelitian untuk menentukan aktivitas antioksidan senyawa flavonoid dengan menggunakan DPPH. Hasil yang diperoleh disajikan dalam Tabel 2.2.

Tabel 2.2 Aktivitas antioksidan senyawa flavonoid hasil penelitian (Ray, 2012)

Senyawa	IC <sub>50</sub> (µg/mL)	Senyawa	IC <sub>50</sub> (µg/mL)
Flavon/flavonol		Morin	17,27
Khrisin	492,57	Acacetin	529,8
Galagin	71,64	Diosmetin	465,13
Apigenin	436,4	Flavanon	
Kaemferol	28,08	Taxifolin	9,27
Luteolin	11,04	Hesperitin	71,64
Quercetin	10,89	Hesperidin	281,41

### 2.3 Senyawa Hesperitin

Hesperitin adalah senyawa flavanon yang ditemukan berlimpah dalam buah jeruk. Senyawa ini bisa didapatkan dengan menghidrolisis hesperidin menggunakan asam sulfat (Swathi dkk, 2012). Hesperitin lebih sukar larut dalam air dibanding hesperidin dan cenderung mudah larut dalam pelarut eter dan kloroform. Hesperitin merupakan bentuk aglikon (tanpa gula) dari hesperidin dan menunjukkan aktivitas biologis dalam tubuh. Struktur hesperitin ditunjukkan pada Gambar 2.5.

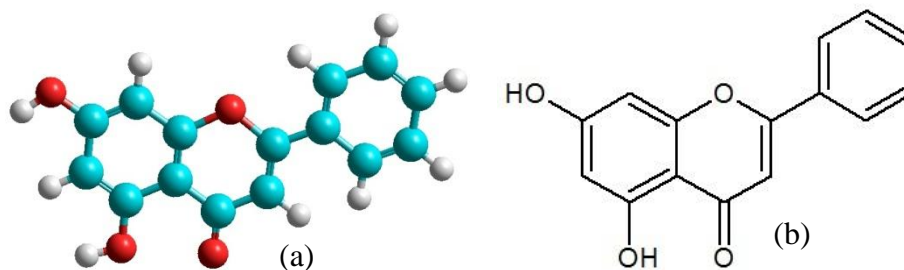


Gambar 2.5 (a) Struktur hesperitin 3D dan (b) Struktur hesperitinn 2D

Hesperitin (hesperitin-7-O-glukosida) menunjukkan sifat anti-inflamasi, antimikroba, antioksidan, dan efek anti kanker dan mencegah keropos tulang (Furtado dkk, 2012). Hesperitin telah dibuktikan menghambat karsinogenesis yang diinduksi agen kimia pada kanker payudara, saluran kemih, dan kolon pada studi *in vivo*. Hesperitin potensial dikembangkan sebagai kemosensitizer pada sel kanker payudara resisten doksorubisin (Sarmoko, 2012).

## 2.4 Senyawa Khrisin

Khrisin adalah jenis flavonoid dari ekstrak bunga blue passion “*Passiflora Caerulea*”, juga terdapat dalam jumlah sedikit dalam sarang tawon dan bunga Trompet India “*Oroxylum indicum*” (<http://en.wikipedia.org/wiki/Chrysin>). Struktur khrisin ditunjukkan pada Gambar 2.6.



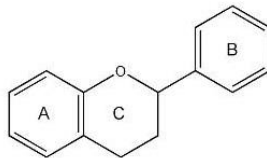
Gambar 2.6 (a) Struktur khrisin 3D dan (b) Struktur khrisin 2D

Khrisin merupakan senyawa turunan flavon yang memiliki aktivitas biologis, memiliki efek farmakologis yang beragam termasuk sifat anti inflamasi, antikanker, dan antioksidan (Manoharan dkk, 2012). Shin dkk (2012) menyatakan bahwa pada konsentrasi 10  $\mu\text{M}$  dan 100  $\mu\text{M}$  khrisin dapat menghambat produksi protein mucin MUC5AC disebabkan oleh PMA, dan pada 100  $\mu\text{M}$  khrisin menghambat ekspresi gen mucin MUC5AC disebabkan oleh PMA atau EGF. Sitotoksisitas khrisin tidak teramati dengan menggunakan alat tes dehidrogenase laktat.

Srinivas dan Saraf (2011) menyatakan bahwa khrisin memiliki spektrum yang lebar untuk aktivitas biologi. Khrisin telah berhasil disintesis dengan tiga tahap dari bahan awal floroglusinol. Florogrusinol diasetilasi dengan asetronitrit dan gas HCl menghasilkan floroasetofenon dengan rendemen mencapai 74%. Benzoilasi floroasetofenon dengan 4,5 ekuivalen benzoil klorida menghasilkan tribenzoil floroasetofenon dengan rendemen 103-107 % dan penataan ulang Baker-Venkataraman produk ester dengan KOH dalam piridina kering menghasilkan khrisin kasar, dengan persen konversi 71,62 % (Utami, 2012).

## **2.5 Substitusi Gugus**

Reaksi substitusi adalah suatu reaksi dalam mana satu atom, ion atau gugus disubstitusikan untuk (menggantikan) atom, ion atau gugus lain (Fessenden dan Fessenden, 1982). Ben-gou dkk (2010) telah menganalisis wilayah paling aktif dalam penambahan H dan HOMO dalam flavonoid.



Gambar 2.7 Struktur senyawa flavonoid

Berdasarkan analisis didapatkan bahwa lingkaran B dan gugusan-gugusan hidroksil pada lingkaran B berperan penting dalam aktivitas antioksidan flavanoid. Struktur molekul flavonoid dapat dibagi menjadi tiga wilayah fungsional : wilayah paling penting aktivitas antioksidan (lingkaran B), wilayah pelengkap aktivitas antioksidan (lingkaran C), wilayah yang dapat menyesuaikan kelarutan dan daya ikat (lingkaran A). Pembagian wilayah disarankan bahwa kelarutan flavanoid baik dalam air maupun fase minyak dapat ditingkatkan dengan menambahkan gugusan hidrofilik dan hidrofobik pada lingkaran A, yang dapat mengoptimalkan aktivitas antioksidan flavanoid.

Gugus alkoksi (OR) dan gugus hidroksi (OH) merupakan gugus pendonor elektron bebas ( $\pi$ ) dan pengaktivasi cincin, serta bersifat hidrofilik. Gugus alkoksi juga merupakan gugus fungsi yang biasanya terdapat pada senyawa eter. Gugus hidroksi lebih polar dari pada eter, karena hidrogen lebih elektropositif dari pada karbon. Oleh karena itu OH lebih polar dari pada ikatan OR (Sardjiman, 2011).

Amina alifatis merupakan seri senyawa yang mengandung gugus amina dinamai alkil amina. Amin merupakan senyawa polar, dan nitrogen membawa muatan negatif parsial. Amina mengalami ikatan hidrogen. Ikatan hidrogen N – H – N lebih lemah dibanding ikatan hidrogen O – H – O, karena atom nitrogen lebih

kecil harga elektronegatifitasnya dibanding atom oksigen, sehingga NH kurang polar dibanding OH (Sardjiman, 2011). Gugus amina merupakan pengarah orto dan para bermuatan negatif pada cincin benzen.

Fluor yang juga dikenal dengan nama fluorin merupakan unsur kimia yang berupa gas pada suhu kamar ( $25^{\circ}\text{C}$ ), berwarna kuning pucat kehijauan, gas korosif, yang bereaksi dengan banyak senyawa organik dan anorganik. Letaknya dalam tabel periodik adalah pada golongan VIIA dan periode 2, jadi dapat dikatakan bahwa terdapat pada kelompok unsur halogen. Fluor merupakan unsur nonlogam yang paling elektronegatif, mempunyai nilai keelektronegatifan 4 (Khotob, 2011). Klor tergolong dalam grup unsur halogen (pembentuk garam) dan diperoleh dari garam klorida dengan mereaksikan zat oksidator atau lebih sering dengan proses elektrolisis. Klor merupakan gas berwarna kuning kehijauan dan dapat bersenyawa dengan hampir semua unsur (Anonim, 2013).

Pada penelitian ini salah satu gugus H pada senyawa khresin akan diganti dengan gugus alkoksi, hidroksi, amina, F, dan Cl. Penambahan gugus alkoksi sebagai pendonor elektron pada posisi cincin A dan B akan dapat meningkatkan aktivitas antioksidan. Aktivitas antioksidan dapat diperoleh dengan menganalisis hubungan kuantitatif dari struktur dan aktivitas (HKSA).

## **2.6 Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA)**

Analisis hubungan kuantitatif dari struktur dan aktivitas (HKSA) merupakan suatu kajian untuk mengembangkan hubungan struktur kimia dengan aktivitas biologis (utamanya aktivitas obat) dari struktur suatu seri senyawa. Asumsi mendasar dari HKSA adalah bahwa terdapat hubungan kuantitatif antara



sifat mikroskopis (struktur molekul dan sifat makroskopis/empiris (aktivitas biologis) dari suatu molekul (Rozaq, 2008). Young (2001) menuliskan salah satu keuntungan dari analisis HKSA dalam teknik pemodelan molekul adalah dapat mengetahui perhitungan sistem biologi yang kompleks tanpa memerlukan banyak informasi dari segi ikatannya. Penggunaan kajian HKSA dapat dilakukan sebagai pendekatan awal untuk penyelesaian kemungkinan molekul dengan prediksi yang lebih akurat.

Kajian HKSA yang utama adalah menentukan struktur kimia yang berpengaruh terhadap aktivitas biologis serta menunjukkan hubungan kuantitatif antara sifat-sifat molekul dengan aktivitas biologisnya, sehingga diperoleh model persamaan matematis HKSA. Persamaan ini selanjutnya dapat digunakan untuk memprediksi aktivitas senyawa baru, yang memiliki aktivitas biologis yang diduga relatif lebih baik. Secara umum HKSA menyatakan bentuk persamaan linier sebagai berikut :

$$\text{Aktivitas biologi} = \text{tetapan} + (C_1 \cdot P_1) + (C_2 \cdot P_2) + (C_3 \cdot P_3) + \dots$$

$P_i$  adalah parameter yang dihitung untuk setiap molekul dalam.  $C_i$  merupakan koefisien yang dihitung dengan variasi fitting dalam parameter dan aktivitas biologis (Pranowo, 2000).

## **2.7 Analisis Statistik dalam HKSA**

Dalam kajian HKSA terdapat banyak metode pengolahan statistika yang dapat dipergunakan untuk memberikan hasil pembahasan yang memuaskan. Metode dasar yang sering digunakan adalah metode regresi multilinier yang merupakan suatu metode yang mengkorelasikan beberapa variabel bebas dengan

variabel tergantung (Kubinyi, 1993). Metode statistik yang banyak digunakan dalam kajian HKSA adalah berupa teknik-teknik untuk pengolahan statistik sehingga diperoleh hasil statistika yang akurat.

### 2.7.1 Korelasi antar variabel

Korelasi adalah mengukur keeratan suatu hubungan, keeratan suatu hubungan ini dinyatakan dengan besaran nilai korelasi ( $r$ ) yang nilainya berada dalam rentang -1 sampai dengan 1 (Wibowo, 2012). Korelasi antar variabel digunakan untuk melihat bagaimana hubungan antar variabel. Hal ini dilakukan terutama dengan melihat tingkat pengaruh tiap-tiap deskriptor molekuler terhadap aktivitas antioksidan. Korelasi akan semakin kuat apabila memiliki nilai yang mendekati -1 atau 1.

Arah korelasi positif menunjukkan bahwa variabel tersebut sebanding dengan aktivitas, sedangkan arah korelasi negatif menunjukkan korelasi yang berlawanan (Santoso, 2000). Beberapa pakar penelitian telah menggolongkan pedoman dalam menilai koefisien korelasi sebagai berikut (Wibowo, 2012) :

Tabel 2.3 Koefisien korelasi

Nilai Interval	Kriteria
0,00 – 0,20	Sangat rendah
0,20 – 0,39	Rendah
0,40 – 0,59	Cukup
0,60 – 0,79	Tinggi
0,80 – 1,00	Sangat tinggi

### 2.7.2 Analisa regresi multilinier

Dalam kajian HKSA analisa regresi multilinier menghubungkan variabel bebas (berupa parameter yang dipilih) dengan suatu variabel tidak bebas (aktivitas

biologi). Rozaq (2008) menyatakan bahwa untuk pemilihan prediktor yang penting agar dihasilkan efek terhadap aktivitas biologis dalam mempelajari HKSA biasanya digunakan analisa regresi linier. Analisa regresi multiliner digunakan untuk mendapatkan persamaan matematis HKSA dan aktivitas biologi prediksi.

Parameter statistik yang dapat digunakan sebagai faktor uji adalah berupa nilai R, R<sup>2</sup>, F, dan SE. Koefisien korelasi, yang dinyatakan dengan r, merupakan ukuran kekuatan hubungan antara variabel tergantung (aktivitas antioksidan) dengan variabel bebas (deskriptor molekuler). Nilai r berjarak dari -1 hingga +1. Nilai -1 menandakan bahwa hubungan variabel bebas dan variabel tergantung negatif sempurna, sedangkan nilai +1 menyatakan hubungan positif sempurna. Jadi, jika r mendekati ± 1, maka hubungan linier antara variabel bebas dan variabel tergantung semakin kuat. Jika r = 0, slope akan sama dengan nol, dan variabel bebas tidak dapat digunakan untuk memprediksi variabel tergantung. Harga r dapat dihitung dengan rumus yang tertulis pada persamaan berikut :

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n X_i Y_i - \left[ \left( \sum_{i=1}^n X_i \right) \left( \frac{\sum_{i=1}^n Y_i}{n} \right) \right]}{\sqrt{\sum_{i=1}^n X_i^2 - \frac{\left( \sum_{i=1}^n X_i \right)^2}{n}} \sqrt{\sum_{i=1}^n Y_i^2 - \frac{\left( \sum_{i=1}^n Y_i \right)^2}{n}}}$$

F merupakan ukuran perbedaan tingkat signifikansi dari model regresi.

Nilai F dihitung dengan rumus yang dituliskan pada persamaan berikut :

$$F = \frac{r^2(n - k - 1)}{k(1 - r^2)}$$

Signifikansi dari persamaan regresi terjadi apabila nilai  $F_{hitung}$  lebih besar dari pada  $F_{kritis}$  untuk batas konfidensi yang ditentukan. Untuk analisis HKSA, tingkat konfidensi yang biasa digunakan adalah 95% atau 99%.

Kadang-kadang dalam suatu set data, terdapat beberapa data di sekitar garis linier. Untuk mengukur data yang menyebar tersebut digunakan suatu perkiraan standard error (SE) seperti pada persamaan berikut :

$$S_{YIX} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{n - 2}}$$

dengan  $Y_i$  adalah nilai Y yang diteliti untuk nilai-nilai  $X_i$  dan  $\hat{Y}_i$  yang diberikan dalam data (Fatimah, 2008). *Standard error* (SE) merupakan nilai toleransi yang terjadi pada koefisien regresi prediksi. Nilai yang semakin kecil pada SE berarti nilai koefisien tidak mudah berubah (Wibowo, 2012).

## 2.8 Deskriptor HKSA

Deskriptor merupakan parameter-parameter yang digunakan dalam model HKSA. Kajian HKSA menggunakan deskriptor untuk menjelaskan struktur dari masing-masing senyawa yang dikaji. Deskriptor-deskriptor yang digunakan dalam kajian ini dapat berupa deskriptor konstitusional, topologikal, elektrostatik, kimia kuantum, dan geometrik (Rozaq, 2008). Penentuan deskriptor merupakan langkah pertama yang sangat penting. Deskriptor memberikan kontribusi yang positif dalam HKSA dengan parameter-parameter tersebut. Apabila terdapat hubungan yang kuat antara deskriptor dan aktivitas, maka aktivitas akan dapat diprediksi, tetapi jika hubungannya lemah, maka tidak bisa diprediksi. Oleh karena itu

deskriptor yang dipilih haruslah mempunyai hubungan yang erat terhadap aktivitas dari senyawa yang diteliti dan nilai parameter-parameter tersebut.

Julia (2008) telah melakukan penelitian aktivitas antioksidan senyawa flavonoid dengan menggunakan deskriptor molekuler seperti :  $E_t$ ,  $E_b$ ,  $E_c$ ,  $\Delta H_f$ ,  $\mu$ ,  $E_{HOMO}$ ,  $E_{LUMO}$ ,  $\log P$ ,  $\alpha$ ,  $R$ , dan GLOB. Dalam menentukan aktivitas antioksidan senyawa turunan flavon dan flavonol, Julia hanya menggunakan deskriptor  $E_t$ ,  $E_b$ ,  $E_c$ ,  $\log P$ ,  $\alpha$ , dan GLOB dan menghasilkan persamaan HKSA dengan nilai  $R^2$  sebesar 0,78. Azra (2008) telah menggunakan deskriptor muatan atom karbon posisi 1-16 untuk menentukan aktivitas antioksidan senyawa flavonoid. Penggunaan  $qC_1$  sampai  $qC_{16}$  sebagai deskriptor molekuler menghasilkan persamaan HKSA dengan nilai  $R^2$  sebesar 0,987.

Srivastava dkk (2012) menggunakan deskriptor molekuler  $\mu$ ,  $MV$ ,  $I_{CED}$ , dan  $I_{OED}$  untuk menentukan aktivitas antioksidan senyawa flavonoid. Penggunaan deskriptor molekuler tersebut menghasilkan persamaan HKSA dengan nilai  $R^2$  sebesar 0,880. Srivastava juga menyatakan bahwa semakin kecil nilai momen dipol, semakin meningkat aktivitas antioksidan senyawa flavonoid. Deskriptor dapat diperoleh dari hasil optimasi metode Recife Model 1 (RM1) dan Ab Initio. Metode semiempirik RM1 dipilih karena memiliki parameter yang jauh lebih baik dari metode semiempiris yang lain, sedangkan metode ab initio dipilih karena memiliki keakuratan tinggi.

## 2.9 Recife Model 1 (RM1)

Metode kimia komputasi dapat dibedakan menjadi 2 bagian besar yaitu mekanika molekuler dan metode struktur elektronik yang terdiri dari *ab initio* dan

semiempiris. Metode mekanika molekuler memungkinkan pemodelan terhadap molekul yang besar tanpa kapasitas dari komputer yang besar dengan proses perhitungan tidak terlalu lama, tetapi metode ini hanya mampu memvisualisasikan perhitungan jumlah energi dan sifat kimia banyak yang tidak didefinisikan. Metode ab initio mampu menganalisis sifat senyawa seperti muatan atom neto, spektrum UV, NMR, dan IR, serta semua elektron diperhitungkan, tetapi memerlukan waktu yang lama dalam perhitungan dan memori komputer yang besar. Metode semiempiris tidak hanya mampu memvisualisasikan perhitungan energi, tetapi juga mampu memvisualisasikan jumlah perhitungan pembentukan panas, dan hanya memperhatikan elektron valensi, sehingga tidak memerlukan waktu yang lama.

Penelitian ini menggunakan metode semiempirik Recife Model 1 (RM1) karena :

1. Perhitungannya tidak memerlukan memori yang besar dan waktu yang lama.
2. Merupakan salah satu metode semiempiris yang merupakan perbaikan atas AM1 dan PM3.
3. Memiliki parameter yang jauh lebih baik.
4. Mampu memodelkan struktur dari sejumlah besar molekul organik, biokimia, dan penelitian farmasi.

Berbeda dengan AM1, dan mirip dengan PM3, semua parameter RM1 telah dioptimalkan.

## 2.10 Ab Initio

Perhitungan komputasi dinamakan *ab initio* jika metode tersebut dibuat tanpa menggunakan data empiris, kecuali untuk tetapan dasar seperti massa elektron dan tetapan Planck yang diperlukan untuk sampai prediksi numerik (Indriadi, 2006). Metode *ab initio* memperhitungkan semua elektron yang terdapat dalam sebuah molekul. Dalam penelitian ini menggunakan metode *ab initio* dengan basis set 6-31G. Basis set 631-G merupakan basis set sedang dan merupakan basis set yang menggunakan orbital tipe *Slater*. Terdapat dua tipe fungsi basis yang umum digunakan dalam perhitungan struktur elektronik yaitu: orbital tipe *Slater* (*STO*) dan orbital tipe *Gaussian* (*GTO*). Keunggulan utama fungsi basis set *Slater* adalah kemampuannya menerangkan sifat orbital pada jarak pendek dan panjang.

Pemilihan himpunan basis ini juga berdasarkan informasi yang didapat dari situs <http://bse.pnl.gov/bse/portal>. Situs tersebut menyimpan berbagai informasi mengenai hasil penelitian yang pernah dilakukan untuk tiap atom yang disajikan dalam bentuk tabel periodik, sehingga dapat dicocokkan tiap atom yang akan diteliti dengan himpunan basis yang pernah diteliti sebelumnya. Dari informasi yang didapat, diketahui bahwa atom karbon (C), Oksigen (O), Hidrogen (H) cocok dengan hampir semua basis set, tapi agar tidak membutuhkan banyak memori maka dipilih basis set tipe sedang yaitu 631-G.

## 2.11 Pemodelan Molekul

Pemodelan molekul merupakan suatu cara untuk menggambarkan atau menampilkan perilaku molekul atau sistem molekul sebagai pendekatan dengan

keadaan yang sebenarnya. Pemodelan molekul dilakukan dengan menggunakan metode-metode mekanika kuantum, mekanika molekuler, minimasi, simulasi, analisis konformasi serta beberapa metode kimia komputasi lain yang memprediksi perilaku molekul (Permana, 2009). Model yang umum dikenal ada dua, yaitu :

- (1) Model molekul dalam bentuk tongkat (*stick*) yang dibuat oleh Dreiding, dan
- (2) Model molekul berupa pengisian ruang (*space filling*) yang dibuat oleh Corey, Pauling dan Koltum. Model ini sering disebut sebagai model CPK.

## 2.12 Optimasi Geometri

Inti prosedur optimasi struktur molekul adalah membandingkan energi struktur yang didapatkan dengan struktur sebelumnya. Energi struktur yang lebih rendah dari sebelumnya menunjukkan kestabilan struktur dibandingkan sebelumnya. Prosedur ini diulang sampai mendapatkan energi struktur yang tidak jauh berbeda dengan sebelumnya.

Penentuan struktur yang stabil dari molekul merupakan langkah perhitungan yang paling umum terjadi pada pemodelan molekul. Energi relatif dari struktur teroptimasi yang berbeda akan menentukan kestabilan konformasi, keseimbangan isomerisasi, panas reaksi, produk reaksi, dan berbagai aspek kimia lainnya. Ada 4 jenis metode optimasi yang sering digunakan, yaitu :

- (1) *Steepest descent*, dikhususkan untuk perhitungan yang cepat agar menghilangkan sterik yang berlebihan dan masalah tolakan pada struktur awal,



- (2) *Conjugate gradient Fletcher-Reeves* untuk mencapai konvergensi yang efisien,
- (3) *Conjugate gradient Polak-Ribiere* hampir sama dengan metode *Fletcher-Reeves*, yaitu untuk mencapai konvergensi yang efisien, dan
- (4) *Black-diagonal newton-repson* (hanya untuk MM+), yang memindahkan satu atom pada suatu waktu dengan menggunakan informasi turunan keduanya (Pranowo, 2000).

## **BAB 3**

### **METODE PENELITIAN**

#### **3.1 Lokasi Penelitian**

Penelitian dilakukan di Laboratorium Kimia FMIPA UNNES Gedung D8 Ruang 355b.

#### **3.2 Variabel Penelitian**

##### **3.2.1 Variabel Bebas**

Variabel bebas adalah variabel yang harganya divariasi. Variabel bebas yang dipelajari dalam penelitian ini adalah nilai deskriptor molekuler senyawa hasil modifikasi senyawa khrisin.

##### **3.2.2 Variabel Terikat**

Variabel terikat adalah variabel yang nilainya tergantung dari variabel bebas. Variabel terikat yang dipelajari dalam penelitian ini adalah hasil eksperimen aktivitas antioksidan dari senyawa khrisin.

#### **3.3 Alat – alat yang digunakan**

##### **3.3.1 Perangkat Keras**

Perangkat keras yang digunakan dalam penelitian ini adalah seperangkat komputer dengan spesifikasi sebagai berikut

- (1) Prosesor tipe *Intel Quart Core*,
- (2) *Harddisk* 250 GB,
- (3) *Random Acces Memory* (RAM) 4 GB, dan

(4) Monitor *Hp LE1851w*.

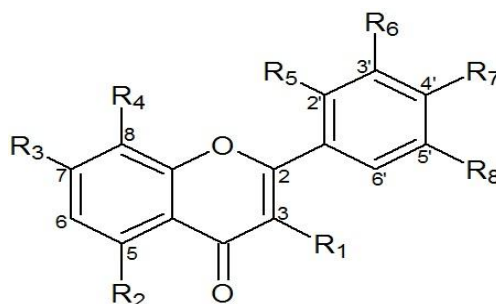
### 3.3.2 Perangkat Lunak

Perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian ini adalah sebagai berikut

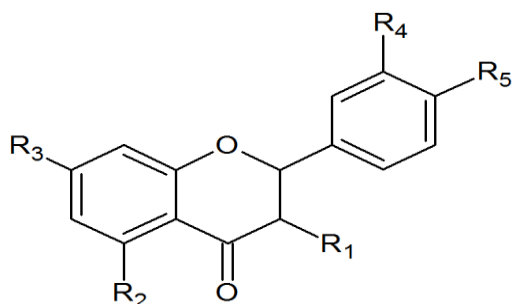
- (1) *Hyperchem* 8.0.7 sebagai software untuk pemodelan molekul serta penghitung parameter energi dan parameter HKSA,
- (2) Sistem operasi yang digunakan adalah *Windows Vista® Business OA (EM)-(SEA)* untuk pemodelan dan untuk perhitungannya,
- (3) *SPSS® for Windows versi 16.0* sebagai software untuk menganalisis korelasi dan menghitung regresi linear, dan
- (4) *Multiple Regression Calculator* untuk menentukan persamaan HKSA dan aktivitas antioksidan prediksi

### 3.4 Materi Penelitian

Dalam penelitian ini digunakan bahan kajian dari penelitian eksperimental yang diperoleh dari literatur (Ray, 2012) yang berupa 10 senyawa turunan flavon/flavonol dan turunan senyawa flavanon berupa senyawa hesperitin beserta data aktivitas antioksidan  $IC_{50}$  yang dapat dilihat pada Tabel 3.1 dan 3.2. Struktur flavon/flavonol dan flavanon ditunjukkan pada Gambar 3.1 dan 3.2.



Gambar 3.1 Struktur flavon dan flavonol



Gambar 3.2 Struktur flavanon dan dihidroflavonol

Tabel 3.1 Aktivitas antioksidan dari senyawa flavon dan flavonol hasil penelitian Ray (2012)

No	Senyawa	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>8</sub>	IC <sub>50</sub>	log 1/IC <sub>50</sub>
1	Khrisin	H	OH	OH	H	H	H	H	H	492,57	-2,692
2	Galagin	OH	OH	OH	H	H	H	H	H	71,64	-1,855
3	Apigenin	H	OH	OH	H	H	H	OH	H	463,4	-2,665
4	Kaemferol	OH	OH	OH	H	H	H	OH	H	28,05	-1,447
5	Luteolin	H	OH	OH	H	H	OH	OH	H	11,04	-1,043
6	Quercetin	OH	OH	OH	H	H	OH	OH	H	10,89	-1,037
7	Morin	OH	OH	OH	H	OH	OH	OH	H	17,27	-1,237
8	Acacetin	H	OH	OH	H	H	H	OCH <sub>3</sub>	H	529,8	-2,919
9	Diosmetin	H	OH	OH	H	H	OH	OCH <sub>3</sub>	H	465,13	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	H	OH	OH	H	H	OCH <sub>3</sub>	OCH <sub>3</sub>	H	313,18	-2,496

Tabel 3.2 Aktivitas antioksidan dari senyawa flavanon dan dihidroflavonol

No	Senyawa	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	IC <sub>50</sub>	log 1/IC <sub>50</sub>
1	Taksifolin	OH	OH	OH	OH	OH	9,27	-0,967
2	Hesperitin	H	OH	OH	OH	OCH <sub>3</sub>	71,64	-1,855

Pada penelitian ini senyawa khrisin dimodifikasi dengan berbagai gugus alkoksi, seperti : metoksi, etoksi, propoksi, isopropoksi, dan t-butoksi. Penggantian gugus H senyawa khrisin dengan gugus metoksi dilakukan pada posisi 3, 8, 2', 3', 4', dan 5', yaitu pada R<sub>1</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, dan R<sub>8</sub> untuk melihat

pada posisi mana yang dapat meningkatkan aktivitas antioksidan. Setelah mengetahui posisi yang dapat meningkatkan aktivitas antioksidan, kemudian dilakukan penggantian gugus pada posisi terpilih dengan gugus etoksi, propoksi, isopropoksi, dan t-butoksi. semua atom karbon tersebut diharapkan memainkan peran penting dalam menentukan aktivitas antioksidan.

Penggantian gugus H senyawa khrosisin dengan gugus OH dan NH<sub>2</sub> diharapkan dapat mengetahui pengaruh kebasaaan dengan aktivitas antioksidan. Penggantian dengan gugus tersebut dilakukan pada posisi 3, 8, 2', 3', 4', dan 5', yaitu pada R<sub>1</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, dan R<sub>8</sub>. Penggantian gugus H senyawa khrosisin dengan gugus F dan Cl dilakukan untuk mengetahui pengaruh keelektronegatifan terhadap aktivitas antioksidan. Penggantian gugus tersebut dilakukan pada posisi 3, 8, 2', 3', 4', dan 5', yaitu pada R<sub>1</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, dan R<sub>8</sub>. Prediksi struktur turunan modifikasi senyawa khrosisin dapat dilihat pada lampiran 1.

### **3.5 Prosedur Penelitian**

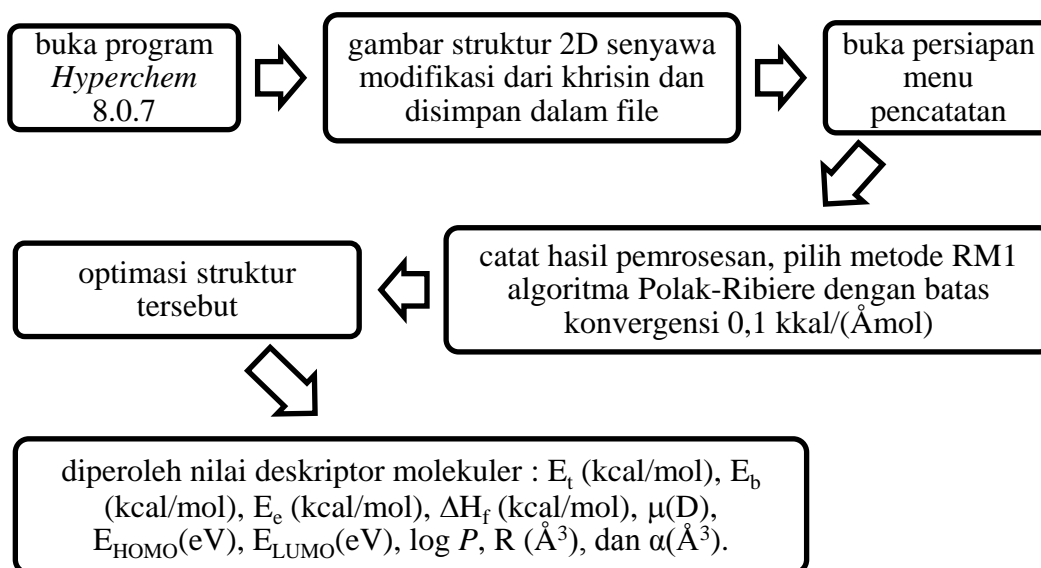
#### **3.5.1 Pemodelan molekul**

Struktur kimia senyawa khrosisin dan hesperitin digambar secara 2D dengan *Hyperchem 8.0.7* dan disimpan dalam file. Selanjutnya substituen R<sub>1</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, dan R<sub>8</sub> pada struktur dasar khrosisin digantikan dengan gugus sebagaimana yang tersaji pada Tabel 3.1, 3.2 dan pada lampiran 1. Pemodelan struktur bertujuan untuk mendapatkan struktur dengan energi minimum sehingga memperoleh keadaan paling stabil.

### 3.5.2 Optimasi geometri

#### 3.5.2.1 Metode Recipe Model 1 (RM1)

Senyawa modifikasi dari khrisin dan hesperitin setelah melalui pemodelan molekul kemudian dioptimasi menggunakan metode semiempirik Recipe Model 1 (RM1) algoritma Polak-Ribiere dengan batas konvergensi 0,1 kkal/(Åmol) untuk mendapatkan struktur yang paling stabil dengan tingkat energi terendah. Setelah itu dicari nilai deskriptor molekuler, diantaranya energi total;  $E_t$  (kcal/mol), energi ikat;  $E_b$  (kcal/mol), energi elektronik;  $E_e$  (kcal/mol), panas pembentukan;  $\Delta H_f$  (kcal/mol), momen dipol;  $\mu(D)$ , energi HOMO(eV), energi LUMO(eV), lipofilitas ( $\log P$ ), refraktivitas;  $R$  (Å<sup>3</sup>), dan polarisabilitas;  $\alpha$ (Å<sup>3</sup>).

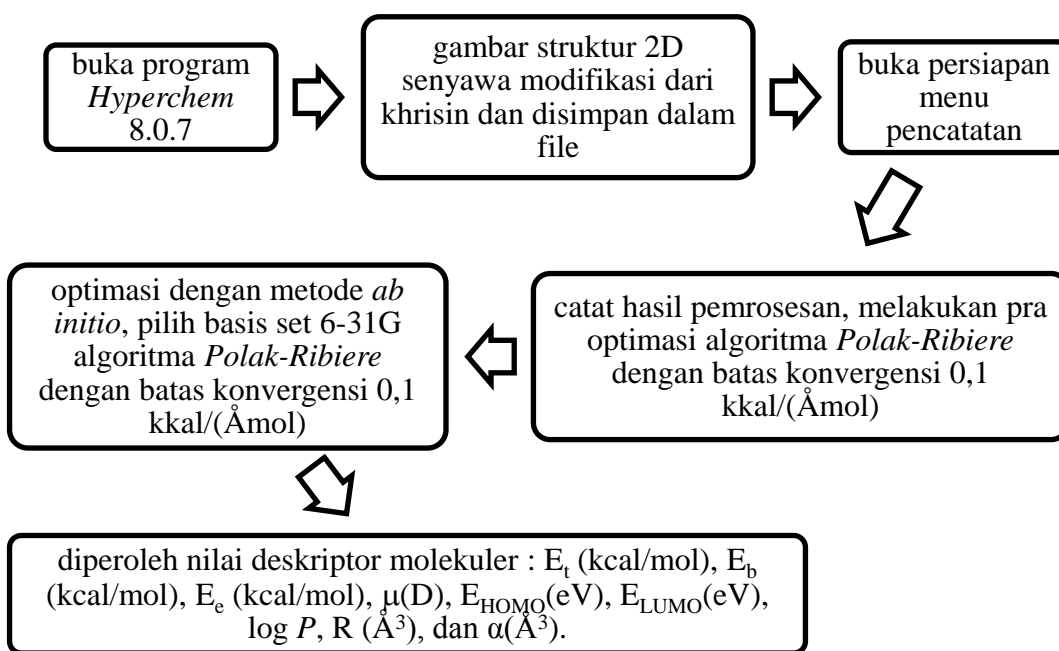


Gambar 3.3 Diagram alur pemodelan molekul dan optimasi geometri menggunakan metode RM1

#### 3.5.2.2 Metode Ab Initio

Senyawa modifikasi dari khrisin dan hesperitin setelah melalui pemodelan molekul kemudian dilakukan pra optimasi dengan menggunakan metode yang

lebih ringan terlebih dahulu, yaitu : mekanika molekuler (MM+), kemudian di optimasi menggunakan metode RM1 dan ab initio dengan basis set minimal. Setelah melakukan pra optimasi, selanjutnya di optimasi menggunakan metode *ab initio* dengan basis set 6-31G algoritma *Polak-Ribiere* dengan batas konvergensi 0,1 kkal/(Åmol) untuk mendapatkan struktur yang paling stabil dengan tingkat energi terendah. Setelah dilakukan optimasi menggunakan *ab initio* dengan basis set 6-31G selajutya didapatkan nilai deskriptor molekuler, diantaranya energi total;  $E_t$  (kcal/mol), energi ikat;  $E_b$  (kcal/mol), energi elektronik;  $E_e$  (kcal/mol), momen dipol;  $\mu$ (D), energi HOMO(eV), energi LUMO(eV), lipofilitas ( $\log P$ ), refraktivitas;  $R$  (Å<sup>3</sup>), dan polarisabilitas;  $\alpha$ (Å<sup>3</sup>).



Gambar 3.4 Diagram alur pemodelan molekul dan optimasi geometri menggunakan metode *ab initio* dengan basis set 6-31G

## 3.6 Analisis Data

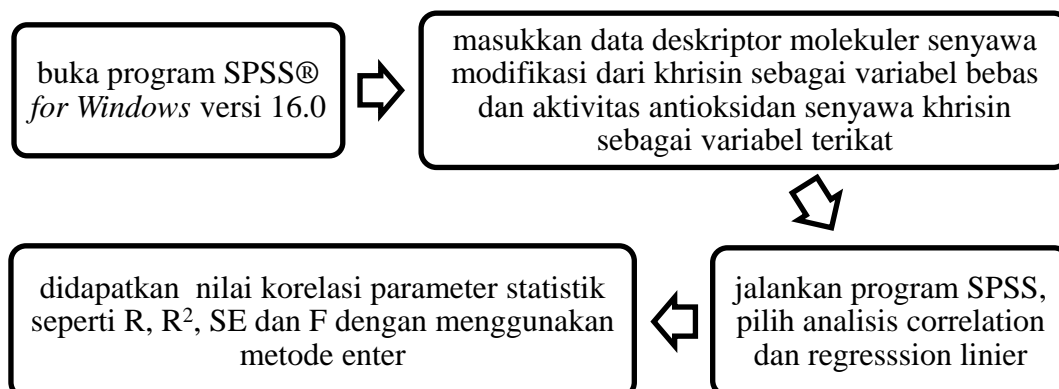
### 3.6.1 Analisis statistik kajian HKSA

#### 3.6.1.1 Analisis korelasi

Setelah mendapatkan deskriptor molekuler kemudian dilakukan analisis korelasi dengan program SPSS® *for Windows* versi 16.0. Analisis ini digunakan untuk mengetahui keeratan hubungan antara variabel bebas dengan aktivitas antioksidan.

#### 3.6.1.2 Analisis regresi multilinier

Analisis regresi multilinier dilakukan dengan program SPSS® *for Windows* versi 16.0 untuk menentukan parameter statistik seperti  $R$ ,  $R^2$ , SE, dan F dengan menggunakan metode enter. Dilakukan variasi jumlah variabel (1, 2, dan 3 variabel) untuk memperoleh persamaan HKSA yang terbaik. Hasil yang diperoleh dari masing-masing jumlah variabel, kemudian diambil model yang memiliki nilai  $R^2$  tertinggi sebagai variabel yang digunakan untuk menentukan aktivitas antioksidan prediksi dan persamaan HKSA terbaik.

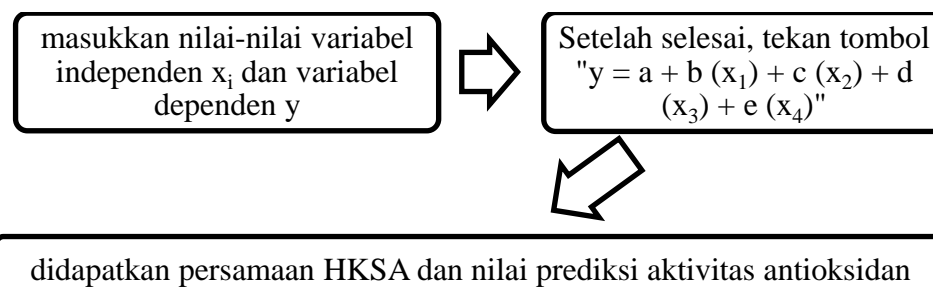


Gambar 3.5 Diagram alur analisis regresi multilinier



### 3.6.2 Menghitung nilai aktivitas antioksidan prediksi

Perhitungan nilai aktivitas antioksidan prediksi dilakukan menggunakan Multiple Regression Calculator yang terdapat pada [www.shodor.org/chemviz/tool](http://www.shodor.org/chemviz/tool)



Gambar 3.6 Diagram alur analisis aktivitas antioksidan prediksi

Multiple Regression Calculator

**Multiple Regression Calculator**

**Regression formula will appear here:**

x1 Value	x2 Value	x3 Value	x4 Value	y Value	Predicted Value

Gambar 3.7 Multiple regression calculator

## BAB 4

### HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

#### 4.1 Hasil optimasi

Dalam perhitungan optimasi geometri, stabilitas struktur ditandai dengan rendahnya energi total. Semakin rendah energi total maka struktur tersebut semakin stabil. Hasil perhitungan optimasi geometri senyawa modifikasi khrisin ditunjukkan pada lampiran 2. Struktur dapat dikatakan stabil apabila memiliki energi total yang kecil. Pada Tabel 4.1 ditunjukkan energi total senyawa turunan flavon/flavonol hasil optimasi menggunakan metode RM1.

Tabel 4.1 Energi total senyawa turunan flavon/flavonol hasil optimasi menggunakan metode RM1.

Senyawa	$E_t$
Khrisin	-75904,89948
Galagin	-83208,07414
Apigenin	-83211,39611
Kaemferol	-90514,59106
5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-97599,23604

Berdasarkan Tabel 4.1 senyawa turunan flavon/flavonol telah stabil pada energi total berkisar antara -97599,23604 sampai dengan -75904,89948. Energi total yang diperoleh senyawa turunan flavon/flavonol digunakan sebagai batasan untuk kestabilan senyawa modifikasi khrisin. Energi total sampel senyawa modifikasi khrisin ditunjukkan pada Tabel 4.2.

Tabel 4.2 Energi total senyawa modifikasi khrisin hasil optimasi menggunakan metode RM1.

Senyawa	$E_t$
5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon	-86749,41833
5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon	-90305,34982
5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon	-93861,05317
5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon	-93846,98513
5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon	-97419,12057
5,7,8-trihidroksi flavon	-83206,42484
3-amina-5,7-dihidroksi flavon	-81071,88667
5,7-dihidroksi-3-fluoro flavon	-86825,28309
5,7-dihidroksi-3-kloro flavon	-84426,54949

Berdasarkan Tabel 4.2 senyawa modifikasi khrisin memiliki energi total lebih kecil dari -75904,89948 dan lebih besar dari -97599,23604, sehingga diharapkan senyawa modifikasi khrisin juga stabil.

Tabel 4.3 Energi total senyawa modifikasi khrisin hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G.

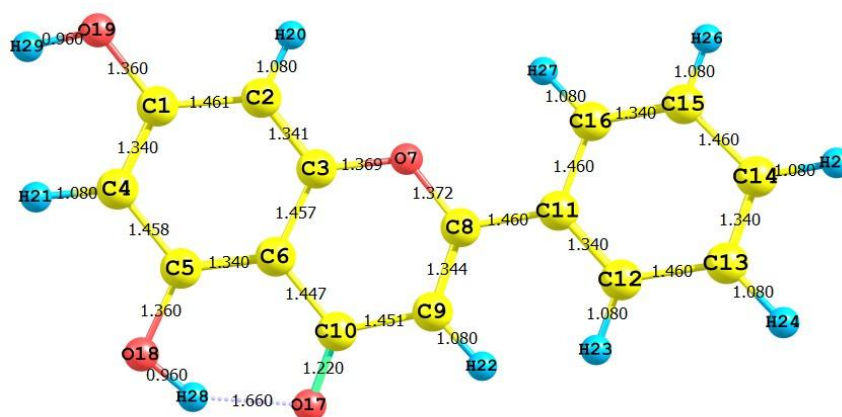
Senyawa	$E_t$
Khrisin	-547793,9440
Galagin	-594744,4195
Apigenin	-594746,2585
Kaemferol	-641696,8650
5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-690644,9223

Berdasarkan Tabel 4.3 senyawa turunan flavon/flavonol telah stabil pada energi total berkisar antara -690644,9223 sampai dengan -547793,944. Energi total yang diperoleh senyawa turunan flavon/flavonol digunakan sebagai batasan untuk kestabilan senyawa modifikasi khrisin. Energi total sampel senyawa modifikasi khrisin ditunjukkan pada Tabel 4.4.

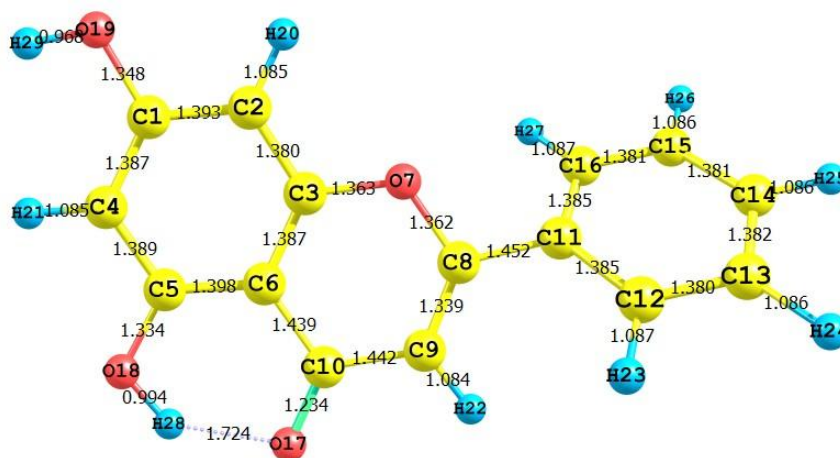
Tabel 4.4 Energi total senyawa modifikasi khrisin hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G.

Senyawa	$E_t$
5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon	-619215,1022
5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon	-643703,6927
5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon	-668188,2322
5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon	-66191,0552
5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon	-692674,6513
5,7,8-trihidroksi flavon	-594736,6996
3-amina-5,7-dihidroksi flavon	-575150,9333
5,7-dihidroksi-3-fluoro flavon	-602218,2682
5,7-dihidroksi-3-kloro flavon	-825952,9733

Berdasarkan Tabel 4.4 senyawa modifikasi khrisin memiliki energi total lebih kecil dari -547793,944, sehingga diharapkan senyawa modifikasi khrisin juga stabil.

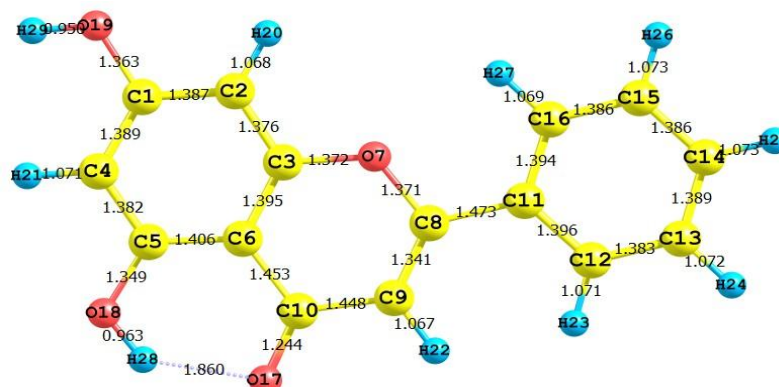


Gambar 4.1 Panjang ikatan ( $\text{\AA}$ ) antar atom dalam struktur khrisin sebelum dioptimasi geometri.



Gambar 4.2 Panjang ikatan ( $\text{\AA}$ ) antar atom dalam struktur khrisin setelah dioptimasi dengan metode semiempiris RM1.

Panjang ikatan antar atom OH dengan C yang belum dioptimasi menunjukkan harga rata-rata  $1,360 \text{ \AA}$  (Gambar 4.1). Panjang ikatan antar atom OH dengan atom C yang sudah dioptimasi dengan menggunakan metode semiempiris RM1, atom-atom OH mulai berinteraksi dan panjang ikatannya mulai menyesuaikan dengan interaksi antar atom, terlihat bahwa ikatan antar atom OH dengan atom C memiliki ikatan yang lebih pendek dari ikatan antar atom OH dengan C sebelum dioptimasi. Rata-rata menunjukkan harga  $1,33 \text{ \AA}$  (Gambar 4.2).



Gambar 4.3 Panjang ikatan ( $\text{\AA}$ ) antar atom dalam struktur khrisin setelah dioptimasi dengan metode Ab Initio dengan basis set 6-31G.

Panjang ikatan antar atom OH dengan atom C yang sudah dioptimasi dengan menggunakan metode *ab initio* dengan basis set 6-31G, atom-atom OH mulai berinteraksi dan panjang ikatannya mulai menyesuaikan dengan interaksi antar atom, terlihat bahwa ikatan antar atom OH dengan atom C memiliki ikatan yang lebih panjang dari ikatan antar atom OH dengan C sebelum dioptimasi. Rata-rata menunjukkan harga 1,35 Å (Gambar 4.3).

## 4.2 Analisis statistik kajian HKSA

### 4.2.1 Korelasi antar variabel

Hubungan antara variabel bebas (deskriptor molekuler) dan variabel terikat (aktivitas antioksidan) ditunjukkan pada Tabel 4.5.

Tabel 4.5 Nilai korelasi antara variabel bebas dengan aktivitas antioksidan

Variabel bebas	Nilai korelasi
Energi total	0,303
Energi ikat	0,426
Energi elektronik	0,315
Panas pembentukan	-0,303
Momen dipol	-0,758
Energi HOMO	0,329
Energi LUMO	-0,385
log P	0,216
Refektivitas	-0,426
Polarisabilitas	-0,430

Berdasarkan Tabel 4.5, dapat dilihat bagaimana urutan nilai korelasi dari terendah ke yang tinggi, yaitu : log P, panas pembentukan, energi total, energi elektronik, energi HUMO, energi LUMO, refraktivitas, energi ikat, polarisabilitas, momen dipol. Hasil analisis menunjukkan bahwa parameter momen dipol merupakan variabel yang paling berpengaruh terhadap aktivitas antioksidan. Hal ini dapat dilihat dari nilai absolut dari nilai korelasi mendekati 1. Karena nilai

korelasi variabel ini berarah negatif, maka pengaruhnya terhadap aktivitas antioksidan cenderung berlawanan.

Variabel bebas yang lain relatif tidak terlalu berpengaruh terhadap aktivitas antioksidan sebab nilai korelasinya terlampau kecil. Meskipun demikian analisis masih harus dilakukan untuk melihat apakah masih ada pengaruh lain yang signifikan atau tidak. Untuk pengkajian variabel berpengaruh lebih lanjut, dilakukan analisis menggunakan metode regresi multilinier untuk mendapatkan sebuah persamaan linier dengan melibatkan deskriptor molekuler sebagai variabel bebas yang dikaitkan dengan aktivitas antioksidan sebagai variabel terikat.

#### **4.2.2 Analisis regresi multilinier**

Berdasarkan hasil analisis korelasi, terlihat bahwa parameter yang paling berpengaruh terhadap aktivitas antioksidan adalah parameter momen dipol. Deskriptor di sejumlah kombinasi telah digunakan untuk analisis regresi multilinier dalam rangka memperoleh model persamaan HKSA. Dengan selalu menyertakan momen dipol, diperoleh 55 model persamaan HKSA terdiri dari 1-3 deskriptor yang ditunjukkan pada lampiran 5. Hasil analisis regresi multilinier diperoleh 5 model senyawa alternatif yang terbaik pada tingkat kepercayaan 95% pada masing-masing jumlah deskriptor. Kelima model tersebut dipilih berdasarkan hasil analisis regresi multilinier dengan menggunakan 1 deskriptor, 2 deskriptor, dan 3 deskriptor, yang memiliki nilai  $R^2$  tertinggi. Kelima parameter statistik model persamaan terpilih disajikan pada Tabel 4.6.

Tabel 4.6 Model persamaan HKSA hasil analisis regresi multilinier

Model	Variabel	R <sup>2</sup>	Variabel	R <sup>2</sup>	Variabel	R <sup>2</sup>
	Satu variabel		Dua variabel		Tiga variabel	
1	$\mu$	0,385	$\mu, E_b$	0,603	$\mu, E_b, E_c$	0,854
2	$E_{HOMO}$	0,374	$\mu, E_{HOMO}$	0,576	$\mu, E_t, \alpha$	0,814
3	$E_b$	0,230	$\mu, E_t$	0,470	$\mu, E_b, \log P$	0,814
4	$\log P$	0,205	$\mu, E_c$	0,339	$\mu, E_t, R$	0,813
5	$E_c$	0,130	$\mu, \log P$	0,331	$\mu, E_t, E_b$	0,812

Hasil analisis menunjukkan bahwa momen dipol merupakan variabel yang berpengaruh terhadap aktivitas antioksidan, melihat nilai korelasinya yang mendekati absolut 1 dan memiliki nilai R<sup>2</sup> tertinggi dari variabel lainnya. Hal ini membuktikan momen dipol memiliki kontribusi penting untuk aktivitas antioksidan. Senyawa yang paling aktif dalam meningkatkan aktivitas antioksidan adalah senyawa yang mempunyai nilai momen dipol relatif kecil. Sehingga senyawa yang relatif polar dapat meningkatkan aktivitas antioksidan.

Kriteria untuk pemilihan persamaan terbaik untuk metode HKSA adalah dengan memperhatikan harga R (koefisien korelasi) dan R<sup>2</sup> yang memiliki harga lebih besar dari 0,8 (80%) untuk persamaan regresi yang diterima. Hasil analisis regresi multilinier dapat dilihat bahwa model terbaik merupakan model dengan menggunakan 3 variabel, karena memiliki nilai R dan R<sup>2</sup> lebih besar dari 0,8. Pada model 1 dengan 3 variabel memiliki nilai R dan R<sup>2</sup> tertinggi, yaitu nilai R sebesar 0,924 dan R<sup>2</sup> sebesar 0,854. Pengambilan keputusan model persamaan HKSA terbaik dilanjutkan dengan mengambil parameter statistik lainnya, yaitu SE dan nilai F. Nilai F hitung harus lebih besar dari pada nilai F kritis pada tingkat kepercayaan 95%. Pada model 1-5 dengan 3 variabel memiliki nilai R



hitung lebih besar dari pada F kritis pada tingkat kepercayaan 95% sebesar 4,757, Sehingga semua model bisa digunakan.

Pada model 1 memiliki nilai SE sebesar 2,097; pada model 2 memiliki nilai SE sebesar 2,975; dan pada model 3 memiliki nilai SE sebesar 2,0127; pada model 4 memiliki nilai SE sebesar 3,460; dan pada model 5 memiliki nilai SE sebesar 2,374. Berdasarkan nilai SE dari kelima model, model 1 memiliki nilai SE terkecil dan model 4 memiliki nilai SE terbesar. Berdasarkan analisis tersebut, maka dipilih model 1 dengan 3 variabel sebagai persamaan HKSA “terbaik”. Pemilihan model 1 sebagai persamaan terbaik didasarkan pada : (1) nilai R dan  $R^2$  yang relatif tinggi yaitu 0,924 dan 0,854. Nilai R dan  $R^2$  yang mendekati 1 ini menyatakan bahwa korelasi antara sifat geometri dengan aktivitas biologis sangat erat, (2) nilai SE (*standard error*) yang paling kecil yaitu 2,097. Harga SE yang kecil menyatakan bahwa penyimpangan data yang terjadi sangat kecil, atau memiliki signifikansi yang tinggi, (3) harga  $F_{hitung}$  lebih besar dari pada  $F_{kritis}$  yaitu 10,150. Nilai  $F_{hitung}$  lebih besar dari  $F_{kritis}$  menyatakan bahwa  $H_1$  diterima, yang berarti memiliki signifikansi pada tingkat kepercayaan 95% antara sifat geometri senyawa uji dengan aktivitasnya sebagai antioksidan. Sehingga parameter yang digunakan pada penelitian ini adalah : momen dipol, energi ikat, dan energi elektronik.

Ditinjau dari nilai korelasi yang ditunjukkan dalam Tabel 4.5, nilai korelasi energi ikat lebih kecil dari pada polarisabilitas, dan nilai korelasi energi elektronik lebih rendah dari pada refraktivitas. Tetapi hasil regresi multilinear, energi ikat dan energi elektronik lebih memiliki pengaruh terhadap aktivitas

antioksidan dibanding dengan polarisabilitas dan refraktivitas. Hal ini dapat dilihat dari hasil optimasi yang telah dilakukan. Harga polarisabilitas dan refraktivitas senyawa modifikasi khresin dengan gugus metoksi disajikan dalam Tabel 4.7.

Tabel 4.7 Harga polarisabilitas dan refraktivitas modifikasi khresin dengan gugus metoksi hasil optimasi menggunakan metode RM1

Senyawa	Polarisabilitas	Refraktivitas
5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon	29,10	84,73
5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon	29,10	84,65
5,7-dihidroksi-2'-metoksi flavon	29,10	84,65
5,7-dihidroksi-3'-metoksi flavon	29,10	84,65
5,7-dihidroksi-4'-metoksi flavon	29,10	84,65
5,7-dihidroksi-5'-metoksi flavon	25,36	75,07

Berdasarkan Tabel 4.7, penggantian gugus H pada khresin dengan gugus metoksi pada posisi 8, 2', 3', dan 4' memiliki nilai polarisabilitas dan refraktivitas yang sama. Nilai yang sama pada posisi berbeda menunjukkan bahwa nilai polarisabilitas dan refraktivitas tidak dapat digunakan untuk memprediksi posisi yang dapat meningkatkan aktivitas antioksidan.

### 4.3 Nilai prediksi aktivitas antioksidan

Aktivitas antioksidan prediksi yang ditentukan dengan menggunakan Multiple Regression Calculator, dimana variabel bebas yang digunakan yaitu : energi ikat, energi elektronik, dan momen dipol, sedangkan variabel terikat menggunakan data aktivitas antioksidan senyawa turunan flavon dan flavonol hasil penelitian (Ray, 2012) yang disajikan pada Tabel 3.1, menghasilkan persamaan HKSA senyawa turunan flavon dan flavonol sebagai berikut :

$$\log(1/IC_{50}) = 2,4686 + (-0,24217)\mu + (0,0046479)E_b (-0,000013884)E_e \dots (1)$$

Tabel 4.8 Nilai prediksi antioksidan senyawa turunan flavon dan flavonol dengan menggunakan metode RM1

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7182	-2,692
2	Galagin	-1,6887	-1,855
3	Apigenin	-2,3671	-2,665
4	Kaemferol	-1,3948	-1,447
5	Luteolin	-1,6873	-1,043
6	Quercetin	-1,3771	-1,037
7	Morin	-0,9674	-1,237
8	Acacetin	-2,988	-2,919
9	Diosmetin	-2,1571	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7122	-2,496

Hasil analisis antioksidan prediksi dengan menggunakan deskriptor molekuler momen dipol, energi ikat, dan energi elektronik yang ditunjukkan pada Tabel 4.8, menunjukkan bahwa selisih antara aktivitas antioksidan prediksi dengan aktivitas antioksidan eksperimen tidak terpaut jauh atau selisihnya kecil. Hal ini juga ditunjukkan pada Tabel 4.9. Analisis antioksidan prediksi dengan menggunakan deskriptor molekuler momen dipol, energi ikat, dan energi elektronik hasil optimasi metode *ab initio* dengan basis set 6-31 menghasilkan persamaan HKSA senyawa turunan flavon/flavonol sebagai berikut.

$$\log(1/IC_{50}) = -11,49 + (-0,25622)\mu + (-0,000067319)E_b + (0,00001197)E_e$$

Tabel 4.9 Aktivitas antioksidan senyawa turunan flavon/flavonol dengan menggunakan metode *ab initio* dengan basis set 6-31G.

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8393	-2,692
2	Galagin	-2,021	-1,855
3	Apigenin	-2,239	-2,665
4	Kaemferol	-1,6507	-1,447
5	Luteolin	-1,5197	-1,043
6	Quercetin	-1,2972	-1,037
7	Morin	-1,0812	-1,237
8	Acacetin	-2,6852	-2,919
9	Diosmetin	-1,8407	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,8841	-2,496

Analisis tersebut menunjukkan bahwa selisih antara aktivitas antioksidan prediksi dengan aktivitas antioksidan eksperimen menggunakan metode *ab initio* dengan basis set 6-31G juga tidak terpaut jauh. Sehingga parameter yang dipilih dapat digunakan untuk menentukan aktivitas antioksidan prediksi senyawa hasil modifikasi dari khrosisin. Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi senyawa khrosisin dengan gugus metoksi yang diperoleh dengan menggunakan variabel bebas (momen dipol, energi ikat, dan energi elektronik) dan aktivitas antioksidan eksperimen dari acacetin sebagai variabel terikat, disajikan dalam Tabel 4.10.

Tabel 4.10 Nilai aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrosisin dengan gugus metoksi dengan metode RM1

Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) prediksi
5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon	-2,4955
5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon	-2,5109
5,7-dihidroksi-2'-metoksi flavon	-2,8623
5,7-dihidroksi-3'-metoksi flavon	-2,8623
5,7-dihidroksi-4'-metoksi flavon (acacetin)	-2,988
5,7-dihidroksi-5'-metoksi flavon	-2,9274

Aktivitas antioksidan prediksi yang ditunjukkan pada Tabel 4.10 dapat dilihat bahwa aktivitas antioksidan prediksi senyawa khrosisin meningkat pada penggantian dengan gugus metoksi pada posisi 3 dan 8. Penggantian gugus alkoksi yang lain pada posisi 3 dan 8 juga dilakukan untuk mengetahui pengaruh atom karbon terhadap aktivitas antioksidan. Aktivitas antioksidan prediksi penggantian dengan gugus alkoksi yang lain disajikan pada Tabel 4.11.

Tabel 4.11 Nilai aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan berbagai gugus alkoksi hasil optimasi metode RM1

Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) prediksi
5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon	-2,6735
5,7-dihidroksi-8-etoksi flavon	-2,6121
5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon	-2,7777
5,7-dihidroksi-8-propoksi flavon	-2,6924
5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon	-2,7002
5,7-dihidroksi-8-isopropoksi flavon	-2,7847
5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon	-2,7823
5,7-dihidroksi-8-t-butoksi flavon	-2,848

Analisis data menunjukkan bahwa molekul yang memiliki rantai karbon lebih panjang tersebut memiliki aktivitas antioksidan yang lebih kecil. Hal ini dikarenakan bahwa semakin panjang rantai karbon, senyawa menjadi semakin non polar. Pengaruh keruahan struktur molekul dapat dilihat pada hasil aktivitas antioksidan prediksi pada penggantian dengan gugus isopropoksi dan t-butoksi pada senyawa khrisin. Aktivitas antioksidan prediksi yang diperoleh dengan penggantian gugus propoksi posisi 3 sebesar -2,7002 dan posisi 8 -2,7847, sedangkan t-butoksi pada posisi 3 sebesar -2,7823 dan posisi 8 sebesar -2,848. Data tersebut menunjukkan bahwa penambahan gugus t-butoksi menghasilkan aktivitas antioksidan prediksi lebih kecil dari pada gugus isopropoksi, Sehingga menunjukkan bahwa semakin meruahnya struktur molekul yang ditambahkan, aktivitas antioksidan juga semakin menurun.

Semakin menurunnya aktivitas antioksidan dengan banyaknya karbon yang ditambahkan dan dengan semakin meruahnya struktur molekul yang ditambahkan juga dapat dilihat dari analisis aktivitas antioksidan prediksi dengan penambahan gugus alkoksi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G.

Tabel 4.12 Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan berbagai gugus alkoksi hasil optimasi *ab initio* dengan basis set 6-31G

Senyawa	$\log (1/IC_{50})$ prediksi
5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon	-2,7443
5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon	-2,8845
3-etoksi-5,7-dihidroksi flavon	-2,8264
8-etoksi-5,7-dihidroksi flavon	-2,9321
5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon	-2,8262
5,7-dihidroksi-8-propoksi flavon	-2,8956
5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon	-2,8311
5,7-dihidroksi-8-isopropoksi flavon	-2,9004
5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon	-2,8220
5,7-dihidroksi-8-t-butoksi flavon	-2,8748

Analisis antioksidan modifikasi khrisin dengan berbagai gugus alkoksi menggunakan metode *ab initio* dengan basis set 6-31G juga menunjukkan bahwa semakin banyak karbon yang ditambahkan, akan semakin menurunkan aktivitas antioksidan, dan meruahnya struktur molekul juga menurunkan aktivitas antioksidan. Sehingga hasil analisis dengan menggunakan parameter hasil optimasi menggunakan metode RM1 dan *ab initio* dengan basis set 6-31G, keduanya menunjukkan bahwa semakin banyak karbon yang ditambahkan dan meruahnya struktur molekul, akan menurunkan aktivitas antioksidan.

Sifat kebasaaan molekul juga memiliki pengaruh terhadap aktivitas antioksidan. Gugus yang memiliki sifat basa yaitu hidroksi dan amina. Aktivitas antioksidan prediksi penggantian dengan gugus hidroksi dan amina disajikan pada tabel 4.13 dan 4.14.

Tabel 4.13 Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan hidroksi hasil optimasi metode RM1

Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) prediksi
5,7,3-dihidroksi flavon (galagin)	-1,6887
5,7,8-dihidroksi flavon	-1,8284
5,7,2'-dihidroksi flavon	-2,6329
5,7,3'-dihidroksi flavon	-1,8597
5,7,4'-dihidroksi flavon (apigenin)	-2,3671
5,7,5'-dihidroksi flavon	-2,5721

Tabel 4.14 Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan amina hasil optimasi metode RM1

Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) prediksi
3-amina-5,7-dihidroksi flavon	-2,7953
8-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,1273
2'-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,0896
3'-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,1765
4'-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,1391
5'-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,1475

Gugus hidroksi memiliki sifat basa yang lebih tinggi dari pada amina. Analisis data menunjukkan bahwa modifikasi khrisin dengan gugus hidroksi memiliki aktivitas antioksidan yang lebih tinggi. Hal ini menunjukkan bahwa semakin basa gugus yang ditambahkan, akan dapat meningkatkan aktivitas antioksidan. Pengaruh penggantian gugus H pada khrisin dengan gugus OH dan NH<sub>2</sub> juga dibuktikan menggunakan metode *ab initio* dengan basis set 6-31G yang disajikan pada Tabel 4.15.

Tabel 4.15 Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan OH dan NH<sub>2</sub> hasil optimasi menggunakan metode *ab initio* dengan basis set 6-31G

Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) prediksi
5,7,3-trihidroksi flavon	-2,021
5,7,8-trihidroksi flavon	-2,6977
3-amina-5,7-dihidroksi flavon	-2,7086
8-amina-5,7-dihidroksi flavon	-2,701

Berdasarkan hasil yang ditunjukkan pada Tabel 4.15, terlihat bahwa penggantian gugus H pada senyawa khrisin dengan gugus OH memiliki aktivitas antioksidan yang lebih tinggi dari pada penggantian dengan gugus NH<sub>2</sub>. Sehingga membuktikan bahwa semakin basa gugus yang ditambahkan, akan meningkatkan aktivitas antioksidan.

Modifikasi khrisin dengan gugus F dan Cl juga dilakukan untuk mengetahui pengaruh keelektronegatifan terhadap aktivitas antioksidan. Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan gugus F dan Cl hasil optimasi menggunakan metode RM1 disajikan pada Tabel 4.16 dan 4.17.

Tabel 4.16 Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan fluor hasil optimasi menggunakan metode RM1

Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) prediksi
5,7-dihidroksi flavon-3-fluoro flavon	-2,3330
5,7-dihidroksi flavon-8-fluoro flavon	-2,1960
5,7-dihidroksi flavon-2'-fluoro flavon	-2,3621
5,7-dihidroksi flavon-3'-fluoro flavon	-2,2955
5,7-dihidroksi flavon-4'-fluoro flavon	-2,3178
5,7-dihidroksi flavon-5'-fluoro flavon	-2,4453

Tabel 4.17 Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrisin dengan klor hasil optimasi menggunakan metode RM1

Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) prediksi
5,7-dihidroksi flavon-3-kloro flavon	-2,9315
5,7-dihidroksi flavon-8-kloro flavon	-2,6831
5,7-dihidroksi flavon-2'-kloro flavon	-2,9561
5,7-dihidroksi flavon-3'-kloro flavon	-2,7207
5,7-dihidroksi flavon-4'-kloro flavon	-2,7342
5,7-dihidroksi flavon-5'-kloro flavon	-3,0094

Analisis tersebut menunjukkan bahwa penggantian gugus dengan fluor memiliki aktivitas antioksidan prediksi lebih tinggi dibandingkan dengan penggantian dengan klor. Hal ini karena fluor memiliki elektronegatifitas tinggi, sehingga



memiliki jumlah proton dan muatan inti positif yang besar, dengan demikian tarikan untuk elektron ikatan bertambah. Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrosis dengan gugus F dan Cl hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G disajikan pada Tabel 4.18.

Tabel 4.18 Aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrosis dengan fluor dan klor hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G

Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) prediksi
5,7-dihidroksi -3-fluoro flavon	-2,1162
5,7-dihidroksi -8-fluoro flavon	-1,7698
5,7-dihidroksi -3-kloro flavon	-2,5401
5,7-dihidroksi -8-kloro flavon	-2,5226

Skala Pauling adalah skala numerik dari keelektronegatifan. skala ini diturunkan dari perhitungan energi-ikatan untuk berbagai unsur yang terikat oleh ikatan kovalen. Dalam skala Pauling, fluor, unsur yang paling elektronegatif, mempunyai nilai keelektronegatifan 4. Oksigen mempunyai nilai keelektronegatifan 3,5. Nitrogen dan klor mempunyai nilai keelektronegatifan 3. Analisis data menunjukkan bahwa modifikasi khrosis dengan gugus OH dan F memiliki aktivitas antioksidan yang lebih tinggi dari aktivitas senyawa khrosis. Oksigen dan fluor memiliki nilai keelektronegatifan tinggi, sehingga dengan penambahan gugus yang memiliki nilai keelektronegatifan tinggi dapat meningkatkan aktivitas antioksidan.

Gugus F memiliki nilai keelektronegatifan lebih tinggi dari pada gugus hidroksil, tetapi pada data menunjukkan bahwa aktivitas antioksidan prediksi modifikasi khrosis dengan gugus OH lebih tinggi dari pada F. Hal ini disebabkan karena gugus OH merupakan gugus pendonor elektron dan pengaktivasi cincin,

sedangkan gugus F merupakan gugus pendeaktivasi cincin. Sehingga gugus pengaktivasi cincin lebih bisa meningkatkan aktivitas antioksidan dari pada pendeaktivasi cincin.

Aktivitas antioksidan prediksi senyawa turunan flavanon yang dihasilkan dengan menggunakan regression multilinear calculator disajikan pada Tabel 4.19 dengan persamaan HKSA sebagai berikut.

$$\log(1/IC_{50}) = -1,827 + (-0,20483)\mu + (0,0027419)E_b + (-0,000013244)E_e$$

Tabel 4.19 Aktivitas antioksidan prediksi senyawa turunan flavanon hasil optimasi menggunakan RM1

No	Senyawa	$\log(1/IC_{50})$ pred.	$\log(1/IC_{50})$ eksp.
1	Taksifolin	-0,74927	-0,967
2	Hesperitin	-1,8441	-1,855

Modifikasi senyawa khrisin yang memiliki aktivitas antioksidan prediksi lebih tinggi dari pada senyawa hesperitin hasil optimasi menggunakan metode RM1 yaitu : senyawa 5,7,3-dihidroksi flavon (galagin) dan 5,7,8-dihidroksi flavon, dengan aktivitas antioksidan sebesar -1,6887 dan -1,8284.

Aktivitas antioksidan prediksi senyawa turunan flavanon hasil optimasi dengan menggunakan metode ab initio disajikan pada Tabel 4.20 dengan persamaan sebagai berikut.

$$\log(1/IC_{50}) = -7,4613 + (-0,14063)\mu + (-0,000020563)E_b + (0,0000041759)E_e$$

Tabel 4.20 Aktivitas antioksidan prediksi senyawa turunan flavanon hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G

No	Senyawa	$\log(1/IC_{50})$ pred.	$\log(1/IC_{50})$ eksp.
1	Taksifolin	-1,1425	-0,967
2	Hesperitin	-1,9693	-1,855

Modifikasi senyawa khrosin yang memiliki aktivitas antioksidan prediksi lebih tinggi dari pada senyawa hesperitin hasil optimasi menggunakan metode ab initio dengan basis set 6-31G yaitu : senyawa 5,7-dihidroksi-8-fluoro flavon dengan nilai aktivitas antioksidan prediksi sebesar -1,7698.

Berdasarkan analisis aktivitas antioksidan hasil optimasi menggunakan metode RM1 dan ab initio dengan basis set 6-31G, didapatkan bahwa antioksidan prediksi hasil dari optimasi menggunakan RM1 lebih mendekati hasil eksperimen dari pada hasil optimasi ab initio.

## **BAB 5**

### **PENUTUP**

#### **5.1 Simpulan**

Dalam kajian HKSA dari senyawa hasil modifikasi dari khrisin berdasarkan deskriptor molekuler dapat disimpulkan beberapa hal, antara lain :

- (1) Terdapat hubungan antara variabel momen dipol, energi ikat, dan energi elektronik dengan aktivitas antioksidan yang dapat dirumuskan dalam persamaan HKSA
- (2) Gugus yang bersifat basa dan memiliki keelektronegatifan dapat meningkatkan aktivitas antioksidan apabila disubstitusikan pada posisi 3 dan 8.
- (3) Aktivitas antioksidan dapat meningkat dengan penambahan gugus yang bersifat basa dan memiliki keelektronegatifan tinggi, tetapi akan menurunkan aktivitas antioksidan dengan penambahan gugus yang memiliki lebih banyak karbon dan keruahan molekul tinggi.
- (4) Modifikasi senyawa khrisin yang memiliki aktivitas antioksidan prediksi lebih tinggi dari pada senyawa hesperitin hasil optimasi menggunakan RM1 yaitu : senyawa 5,7,3-dihidroksi flavon (galagin) dan 5,7,8-dihidroksi flavon, dengan nilai aktivitas antioksidan prediksi sebesar -1,6887 dan -1,8284. Sedangkan dengan menggunakan ab initio dengan basis set 6-31G yaitu senyawa 5,7-dihidroksi-8-fluoro flavon dengan nilai aktivitas antioksidan prediksi sebesar -1,7698.

## **5.2 Saran**

Berdasarkan penelitian yang sudah dilakukan, hasil analisis aktivitas antioksidan senyawa modifikasi khrisin masih bersifat teoritis dan perlu dibuktikan dengan eksperimen secara riil di laboratorium.

## DAFTAR PUSTAKA

- Achmad, S.A. 1986. *Kimia Organik Bahan Alam*. Jakarta : Penerbit Karunika Universitas Terbuka.
- Aini, N, B. Purwono, dan I. Tahir. 2006. Analisis Hubungan Struktur-Aktivitas Antioksidan dari Isoeugenol, Eugenol, Vanilin dan Turunannya. *Indo.J.Chem.*, 7 (1), 61-66. Yogyakarta: UGM.
- Anonim. 2013. *Klor*. disadur dari [http://www.chem-is-try.org/tabel\\_periodik/klor/](http://www.chem-is-try.org/tabel_periodik/klor/) yang diakses pada 21 Agustus 2013.
- Amic, D., Dusanka, D. Beslo, dan N. Trinajstic. 2003. Structure-Radical Scavenging Activity Relationships of Flavonoids. *Croatica Chemica Acta CCACAA 76 (1) 55-61 (2003)*. Croatia : Faculty of Agriculture, The Josip Juraj Strossmayer University.
- Azra, F. 2008. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Antioksidan Satu Seri Senyawa Turunan Flavonoid. *Jurnal S3 Kimia UGM*. Yogyakarta : UGM.
- Ben-gou, L., Y.Ji-guo, G. Ye, N. Zheng-xiang, dan G. Jian-hua. 2010. Division of Antioxidant Functional Regions of Flavonoids Based on Quantum Chemistry Analysis. *Jurnal food science 2010, Vol. 31, No. 1*. Xinxiang : School of Food Science, Henan Institute of Science and Technology.
- Fatimah, N.F. 2008. *Aplikasi Metode MLR Dan PCR Pada Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Dan Aktivitas Antitoksoplasma Senyawa Turunan Kuinolon Berdasarkan Deskriptor Teoritik*. Skripsi. Yogyakarta : UGM.
- Fessenden dan Fessenden. 1982. *Kimia Organik Jilid 1*. Jakarta: Erlangga.
- Furtado, A.F.M, Mario A. P. Nunes, dan Maria H. L. Ribeiro. 2012. *Hesperidinase encapsulation towards hesperitin production targeting improved bioavailability*. Article first published online: 24 OCT 2012 pada <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jmr.2224/abstract>.
- Harborne, J.B., 1987, *Metode Fitokimia: Penuntun Cara modern Menganalisis Tumbuhan*. Diterjemahkan oleh Padmawinta, K. Dan Soediro. Bandung: Institut Teknologi Bandung Press.
- Huk I, V. Brovkovich, Nanobash. 1998. Bioflavonoid quercetin scavenges superoxide and increases nitric oksida concentration in ischemia-reperfusion injury : an experimental study. *Br J Syrg*, 85:1080-1085.
- <http://en.wikipedia.org/wiki/Chrysin>.
- Indriadi, N. 2006. *Kajian Teoritis Reaksi Dekomposisi Seyawa Eritromisin A dan  $\Delta^{6,7}$  Anhidroeritromisin A Dengan Metode Semiempiris CNDO*. Skripsi. Yogyakarta : UGM

- Julia, D. 2008. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Antioksidan Senyawa Turunan Flavonoid Dengan Deskriptor Molekular Hasil Kalkulasi Metode Austin Model 1 (AM1). *Jurnal Kimia Mulawarman Volume 5 Nomor 2*. Samarinda : Universitas Mulawarman.
- Ketaren, S. 1986. *Minyak dan Lemak Pangan*. Jakarta : Universitas Indonesia.
- Khotob, A. I. 2011. *FLUOR (sejarah, manfaat, sifat, keberadaan di alam, cara pembuatan)*. disadur dari <http://blogibnuseru.blogspot.com/> yang diakses pada 3 November 2011.
- Kochhar, S.P., and Rossel, J.B., 1990. Detection, Estimation and Evaluation of Antioxidants in Food Sistem. *Food Antioxidant : Elsvier Sci. Publ. LTD. London New York*.
- Kubinyi, H. 1993. *QSAR : Hans Analysis and Related Approaches*. Weinhem : VCH Verlagsgesellschaft.
- Liu, H. Y. Mou, J. Zhao, J. Wang, L. Zhou, M. Wang, D. Wang, J. Han, Z. Yu dan F. Yang. 2010. Flavonoids from *Halostachys caspica* and Their Antimicrobial and Antioxidant Activities. *Jurnal Molecules 2010, 15, 7933-7945*. Beijing : China Agricultural University.
- Manoharan, S., M.P.Murugaraj, B. Nagarethinam, S. Ramachandran, K. Sekar, A.W. Shamsul. 2012. Chemopreventive Potential of Chrysin in 7,12-dimethylbenz(a)anthracene Induced Skin Carcinogenesis in Swiss Albino Mice. *Int.J.Res.Pharm.Sci., 3(1), 86-96*. India : Annamalai University.
- Nawar, W. W. 1985. *Lipid, Food Chemistry*, edited by O. R. Fennerma Marcel Dekker. New York : Inc.
- O'Malley, P.J. 2002. *Chem.Phys.Let. 364, 318-322*.
- Permana, E.H. 2009. *Eritromisin F dan  $\Delta^{6,7}$  Anhidroeritromisin F Suatu Kajian Menggunakan Semiempiris Austin Model 1 (AM1)*. Semarang : Skripsi UNNES.
- Pranowo, H.D. 2000. *Kimia Komputasi*. Yogyakarta: Pusat Kimia komputasi Indonesia-Austria Universitas Gadjah Mada.
- Pratt, D.E. 1992. *Natural Antioksidants From Plant Material*. editor: M.T. Huang, C.T. Ho, dan C.Y. Lee, *Phenolic Compounds in Food ans Their Effects on Health H*. American Society. Washington DC.
- Puspita-Nienaber, N. L., W.P. Rahayu, dan N. Andarwulan. 1997. *Sifat Antioksidan dan Antimikroba Rempah-Rempah dan Bumbu Tradisional, Makalah Seminar Sehari Khasiat Keamanan Pangan Bumbu dan Jamu Tradisional*. Yogyakarta.
- Ray, S. 2012. A Theoretical Study Of 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl (DPPH) Radical Scavenging Activities Of Flavonoids Using Electropological State Atom (E-State) Parameters. *Int J Pharm Bio Sci 2012 July; 3(3) : (P) 543-*

550. India : Division of Pharmaceutical Chemistry, Dr. B C Roy College of Pharmacy & Allied Health Sciences.
- Robinson, T. 1995. *Kandungan Organik Tumbuhan Tinggi*. Edisi VI, Hal 191-216 Diterjemahkan oleh Kosasih Padmawinata. Bandung : ITB.
- Rozaq, A. 2008. *Penggunaan Deskriptor Sterik Untuk Analisis HKSA Antimalaria Senyawa Analog 1,10-Fenantrolin Berdasarkan Analisis MLR dan PCR*. Skripsi. Yogyakarta : UGM.
- Santoso, S. 2004. *Buku Latihan SPSS Statistik Multivariat*. Jakarta: PT Elex Media Komputindo.
- Sarastani, D; T.S. Suwarna; T.R.Muchtadi; D. Fardiaz dan A. Apriyanto. 2002. Aktivitas Antioksidan Ekstrak dan Fraksi Ekstrak Biji Atung. *Jurnal Teknologi dan industri Pangan*. Vol. XIII. No.2. 149-156.
- Sardjiman. 2011. *Belajar Kimia Organik Metode Iqro'*. Yogyakarta : Pustaka Pelajar.
- Sarmoko. 2012. *Peningkatan Sensitivitas Sel MCF-7/DOX terhadap Doksorubisin Oleh Hesperitin Melalui Penghambatan Ekspresi P-Glikoprotein*. Tesis. Yogyakarta : UGM.
- Shin, H. D, J.L. Hyun, S. Asaduzzaman, S.H. Park, J. Ryu, J.H. Hong, J.O. Kim, J.H. Seok, dan C.J. Lee. 2012. Effect of Chrysin on Gene Expression and Production of MUC5AC Mucin from Cultured Airway Epithelial Cells. *Tuberc Respir Dis* 2012;73:204-209. Daejeon : Chungnam National University School of Medicine.
- Shutenko Z, Y. Henry, E. Pinard. 1999. Influence of the antioxidant quercetin in vivo on the level of nitric oksida determined by electron paramagnetic resonance in rat brain during global ischemia and reperfusion. *Biochem Pharmacol*, 57:199-208.
- Srinivas, K.S. dan A. Saraf. 2011. High Performance Thin Layer Chromatographic Determination of Chrysin in *Oroxylum Indicum* Vent. from Different Geographical Regions of India. *E-Journal of Chemistry* 2012, 9(1), 313-317. Mumbai : Department of Botany, The Institute of Science
- Srivastava, A.K., R. Gupta, R. Srivastava, dan D.K. Mishra. 2012. Application Of Electron Density And Molar Volume As Descriptors In Qsar Study Of The Antioxidant Activity Of Flavonoids. *IJPSR* (2012), Vol. 3, Issue 08 : 2648-2654. India : Department of Chemistry, M.L.K. (P.G.) College.
- Steinberg D. 2009. The LDL modification hypothesis of atherogenesis. *Journal of Lipid Research* 50:376-381.
- Swathi, D., B. Sarika, V. Maravajhala. 2012. Biotransformation Of Hesperidine To Hesperitine By *Cunninghamella Elegans*. *Asian Journal of Pharmaceutical and Clinical Research* Vol 5, Suppl 2, 2012. India : Institute of Pharmaceutical Technology.



- Tarigan, S. 2009. Analisis QSAR Senyawa Turunan Flavon/Flavonol dengan Menggunakan Pendekatan Analisis Hansh. *Jurnal Kultura volume: 10 No 1, Desember 2009*. Medan : Universitas Quality.
- Trilaksani, W. 2003. *Antioksidan: Jenis, Sumber, Mekanisme Kerja dan Peran Terhadap Kesehatan*. Disertasi S3 : Institut Pertanian Bogor.
- Tyler, V.E., L.R. Brady, J.E. Roberr. 1976. *Pharmacognosy*, Seventh Ed., Lea&Febiger, Philadelphia.
- Utami, D. 2012. *Sintesis Krisin dari Floroglusinol*. Skripsi. Bogor: Institut Pertanian Bogor.
- Waji, R.A., dan A. Sugrani. 2009. *Makalah Kimia Organik Bahan Alam Flavonoid (Quercetin)*. Makasar : Universitas Hasanuddin.
- Waner, S., and Steven. 1997. Multiple Linear Regression. *Javascript source code Copyright © 1997 Stefan Waner and Steven R. Costenoble, and used by permission of the authors.* pada <http://www.shodor.org/chemviz/tools/multireg/>.
- Wibowo, A.E. 2012. *Aplikasi Praktis SPSS dalam Penelitian*. Yogyakarta : Gava Media.
- Young, D.C. 2001. *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. ISBNs: 0-471-33368-9 (*Hardback*); 0-471-22065-5 (*Electronic*).

## Lampiran 1

### Prediksi struktur modifikasi senyawa khrisin

No	Senyawa	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	R <sub>8</sub>
1	5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon	OCH <sub>3</sub>	OH	OH	H	H	H	H	H
2	5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon	H	OH	OH	OCH <sub>3</sub>	H	H	H	H
3	5,7-dihidroksi-2'-metoksi flavon	H	OH	OH	H	OCH <sub>3</sub>	H	H	H
4	5,7-dihidroksi-3'-metoksi flavon	H	OH	OH	H	H	OCH <sub>3</sub>	H	H
5	5,7-dihidroksi-5'-metoksi flavon	H	OH	OH	H	H	H	H	OCH <sub>3</sub>
6	5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon	OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	OH	OH	H	H	H	H	H
7	5,7-dihidroksi-8-etoksi flavon	H	OH	OH	OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	H	H	H
8	5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon	OC <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	OH	OH	H	H	H	H	H
9	5,7-dihidroksi-8-propoksi flavon	H	OH	OH	OC <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	H	H	H	H
10	5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{OCH}-\text{CH}_3 \end{array}$	OH	OH	H	H	H	H	H
11	5,7-dihidroksi-8-isopropoksi flavon	H	OH	OH	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{OCH}-\text{CH}_3 \end{array}$	H	H	H	H
12	5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{OC}-\text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	OH	OH	H	H	H	H	H
13	5,7-dihidroksi-8-t-butoksi flavon	H	OH	OH	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{OC}-\text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$	H	H	H	H
14	5,7,8-trihidroksi flavon	H	OH	OH	OH	H	H	H	H
15	5,7,2'-trihidroksi flavon	H	OH	OH	H	OH	H	H	H
16	5,7,3'-trihidroksi flavon	H	OH	OH	H	H	OH	H	H
17	5,7,5'-trihidroksi flavon	H	OH	OH	H	H	H	H	OH

18	3-amina-5,7-dihidroksi flavon	NH <sub>2</sub>	OH	OH	H	H	H	H	H
19	8-amina-5,7-dihidroksi flavon	H	OH	OH	NH <sub>2</sub>	H	H	H	H
20	2'-amina-5,7-dihidroksi flavon	H	OH	OH	H	NH <sub>2</sub>	H	H	H
21	3'-amina-5,7-dihidroksi flavon	H	OH	OH	H	H	NH <sub>2</sub>	H	H
22	4'-amina-5,7-dihidroksi flavon	H	OH	OH	H	H	H	NH <sub>2</sub>	H
23	5'-amina-5,7-dihidroksi flavon	H	OH	OH	H	H	H	H	NH <sub>2</sub>
24	5,7-dihidroksi-3-fluoro flavon	F	OH	OH	H	H	H	H	H
25	5,7-dihidroksi-8-fluoro flavon	H	OH	OH	F	H	H	H	H
26	5,7-dihidroksi-2'-fluoro flavon	H	OH	OH	H	F	H	H	H
27	5,7-dihidroksi-3'-fluoro flavon	H	OH	OH	H	H	F	H	H
28	5,7-dihidroksi-4'-fluoro flavon	H	OH	OH	H	H	H	F	H
29	5,7-dihidroksi-5'-fluoro flavon	H	OH	OH	H	H	H	H	F
30	5,7-dihidroksi-3-kloro flavon	Cl	OH	OH	H	H	H	H	H
31	5,7-dihidroksi-8-kloro flavon	H	OH	OH	Cl	H	H	H	H
32	5,7-dihidroksi-2'-kloro flavon	H	OH	OH	H	Cl	H	H	H
33	5,7-dihidroksi-3'-kloro flavon	H	OH	OH	H	H	Cl	H	H
34	5,7-dihidroksi-4'-kloro flavon	H	OH	OH	H	H	H	Cl	H
35	5,7-dihidroksi-5'-kloro flavon	H	OH	OH	H	H	H	H	Cl

## Lampiran 2

### Hasil perhitungan optimasi geometri

#### a. Hasil optimasi geometri senyawa modifikasi khrisin menggunakan metode RM1

##### 1) Senyawa turunan flavon/flavonol

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R ( $\text{\AA}^3$ )	$\alpha$ ( $\text{\AA}^3$ )
1	Khrosisin	-75904.89948	-2326.462885	-455367.2819	996.143115	2.874	-9.13758	-0.770521	-1.06	78.28	26.63
2	Galagin	-83208.07414	-2340.065442	-510029.7193	1042.09955	1.496	-8.95955	-0.843884	-1.96	79.96	27.27
3	Apigenin	-83211.39611	-2343.387407	-498369.665	1038.77759	3.565	-9.09247	-0.767824	-2.09	79.88	27.27
4	Kaemferol	-90514.59106	-2357.00026	-554874.0787	1084.72374	2.528	-8.88049	-0.843274	-2.99	81.56	27.90
5	Luteolin	-90516.3002	-2358.709404	-547490.3676	1038.01459	3.28	-9.08417	-0.825805	-3.11	86.26	29.74
6	Quercetin	-90514.5441	-2356.953303	-554875.5268	1084.77069	2.456	-8.80126	-0.845296	-2.99	81.56	27.90
7	Morin	-97819.7981	-2372.625199	-613597.0288	1128.65780	3.83	-8.73339	-0.697282	-4.01	83.17	28.54
8	Acacatin	-86754.2482	-2574.495408	-538497.5522	1082.76359	3.994	-9.06163	-0.737460	-2.06	84.65	29.10
9	Diosmetin	-94057.1316	-2587.796717	-591353.8997	1129.02128	3.338	-9.12743	-0.855637	-3.08	86.26	29.74
10	5,7-dihidroksi- 3',4'-dimetoksi flavon	-97599.23604	-2818.157069	-641066.4483	1173.75493	4.059	-9.09064	-0.865316	-3.05	91.03	31.57

##### 2) Senyawa turunan flavanon

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R ( $\text{\AA}^3$ )	$\alpha$ ( $\text{\AA}^3$ )
1	Taksifolin	-98482.22971	-2509.450495	-628145.2934	1096.03650	1.76	-9.906969	-0.602559	-3.02	81.20	28.73
2	hesperitin	-94727.37446	-2732.433262	-609561.0039	1088.58873	3.369	-9.028015	-0.5092253	-2.56	84.63	29.93

## 3) Modifikasi senyawa khresin dengan gugus alkoksi

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R ( $\text{\AA}^3$ )	$\alpha$ ( $\text{\AA}^3$ )
11	5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon	-86749.41833	-2569.665539	-559874.7457	1087.59346	2.133	-9.04850	-0.795496	-1.93	84.73	29.10
12	5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon	-86749.35043	-2569.597646	-559559.3144	1087.66135	2.821	-9.02636	-0.802424	-2.06	84.65	29.10
13	5,7-dihidroksi-2'-metoksi flavon	-86752.49351	-2572.740721	-556952.5445	1084.51827	4.459	-8.99236	-0.648394	-2.06	84.65	29.10
14	5,7-dihidroksi-3'-metoksi flavon	-86753.43092	-2573.678129	-544556.5129	1083.58087	2.671	-9.16443	-0.801659	-2.06	84.65	29.10
15	5,7-dihidroksi-4'-metoksi flavon	-86753.43092	-2573.678129	-544556.5129	1083.58087	2.671	-9.16443	-0.801659	-2.06	84.65	29.10
16	5,7-dihidroksi-5'-metoksi flavon	-61288.22388	-2288.961476	-362760.309	914.526523	3.385	-9.2778	-0.60842	0.99	75.07	25.36
17	5,7-dihidroksi -3-etoksi flavon	-90305.34982	-2813.862942	-607081.3071	1118.50005	1.89	-8.99829	-0.765857	-1.59	89.48	30.94
18	5,7-dihidroksi -8-etoksi flavon	-90305.11311	-2813.616235	-606249.1454	1118.73676	2.944	-8.99655	-0.791969	-1.71	89.40	30.94
19	5,7-dihidroksi -3-propoksi flavon	-93861.05317	-3057.812206	-651683.3333	1149.63479	1.819	-8.98873	-0.761048	-1.12	94.00	32.77
20	5,7-dihidroksi -8-propoksi flavon	-93859.39086	-3056.149897	-655183.3682	1151.29710	3.201	-8.93984	-0.880000	-1.24	93.92	32.77
21	5,7-dihidroksi -3-isopropoksi flavon	-93846.98513	-3043.744164	-664116.7551	1163.70284	1.175	-8.78987	-0.127452	-1.18	93.89	32.77
22	5,7-dihidroksi -8-isopropoksi flavon	-93843.7553	-3040.514337	-650036.6704	1166.93266	2.016	-9.15683	-0.694549	-1.30	93.82	32.77
23	5,7-dihidroksi -3-t-butoksi flavon	-97419.12057	-3304.135522	-719715.8179	1178.40547	1.991	-8.98859	-0.745071	-1.10	98.53	34.61
24	5,7-dihidroksi -8-t-butoksi flavon	-97421.43337	-3306.448321	-720969.4739	1176.09267	3.024	-8.91707	-0.759299	-1.22	98.46	34.61

4) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus OH dan NH<sub>2</sub>

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R (Å <sup>3</sup> )	$\alpha$ (Å <sup>3</sup> )
25	5,7,8-trihidroksi flavon	-83206.42484	-2338.416144	-509219.8781	1043.74885	2.606	-8.837104	-0.7959739	-2.09	79.88	27.27
26	5,7,2'-trihidroksi flavon	-83209.76231	-2341.753609	-509229.9939	1040.41139	4.402	-8.991024	-0.6694611	-2.09	79.88	27.27
27	5,7,3'-trihidroksi flavon	-83210.57151	-2342.562806	-500616.9647	1039.60219	2.125	-9.187181	-0.8368695	-2.09	79.88	27.27
28	5,7,5'-trihidroksi flavon	-83210.32392	-2342.315223	-499958.9642	1039.84977	3.909	-9.134937	-0.8285154	-2.09	79.88	27.27
29	3-amina -5,7-dihidroksi - flavon	-81071.88667	-2562.926027	-507257.3403	924.781972	2.026	-8.30259	-0.6255613	-2.66	81.90	27.98
30	8-amina -5,7-dihidroksi - flavon	-81068.81156	-2559.850916	-506273.1016	927.857083	4.384	-7.887661	-0.6650045	-2.78	81.83	27.98
31	2'-amina -5,7-dihidroksi - flavon	-81075.07923	-2566.118584	-505880.753	921.589416	3.544	-8.577752	-0.5970093	-2.78	81.83	27.98
32	3'-amina -5,7-dihidroksi - flavon	-81074.36685	-2565.406204	-498099.9617	922.301796	4.489	-8.553902	-0.6562952	-2.78	81.83	27.98
33	4'-amina -5,7-dihidroksi - flavon	-81076.12867	-2567.168029	-495813.718	920.539971	5.289	-8.547836	-0.5345551	-2.78	81.83	27.98
34	5'-amina -5,7-dihidroksi - flavon	-81074.30392	-2565.343275	-497485.3223	922.364724	3.612	-8.552224	-0.6601862	-2.78	81.83	27.98

## 5) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus fluor dan klor

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R ( $\text{\AA}^3$ )	$\alpha$ ( $\text{\AA}^3$ )
35	5,7-dihidroksi -3- flouro flavon	-86825.28309	-2387.546894	-513502.678	901.847105	3.192	-9.24766	-0.9540106	-1.54	78.48	26.54
36	5,7-dihidroksi -8- flouro flavon	-86825.60678	-2387.870584	-512725.5429	901.523416	1.686	-9.113747	-0.9223703	-1.66	78.41	26.54
37	5,7-dihidroksi -2'- flouro flavon	-86828.62562	-2390.889424	-512748.9915	898.504576	3.217	-9.118596	-0.9210618	-1.66	78.41	26.54
38	5,7-dihidroksi -3'- flouro flavon	-86829.25576	-2391.519561	-503751.1625	897.874439	1.618	-9.225302	-0.9608211	-1.66	78.41	26.54
39	5,7-dihidroksi -4'- flouro flavon	-86829.81588	-2392.079684	-501533.2372	897.314316	1.651	-9.221739	-0.9584879	-1.66	78.41	26.54
40	5,7-dihidroksi -5'- flouro flavon	-86829.24783	-2391.511637	-503162.3412	897.882362	3.037	-9.231418	-0.9646387	-1.66	78.41	26.54
41	5,7-dihidroksi -3- kloro flavon	-84426.54949	-2527.667969	-506957.7734	771.826030	3.23	-9.241281	-0.9559517	-1.16	83.07	28.56
42	5,7-dihidroksi -8- kloro flavon	-84426.02835	-2527.146825	-506187.4292	772.347151	1.755	-9.116358	-0.9141045	-1.28	82.99	28.56
43	5,7-dihidroksi -2'- kloro flavon	-84428.60302	-2529.721497	-506388.4256	769.772503	3.31	-9.131452	-0.856654	-1.28	82.99	28.56
44	5,7-dihidroksi -3'- kloro flavon	-84429.89123	-2531.009707	-497563.0996	768.484292	1.525	-9.239991	-1.005273	-1.28	82.99	28.56
45	5,7-dihidroksi -4'- kloro flavon	-84430.13624	-2531.254722	-495373.3049	768.239277	1.524	-9.253107	-1.021757	-1.28	82.99	28.56
46	5,7-dihidroksi -5'- kloro flavon	-84429.91076	-2531.029235	-496947.2441	768.464765	3.166	-9.249411	-1.005493	-1.28	82.99	28.56

**b. Hasil optimasi geometri senyawa modifikasi khrisin menggunakan metode Ab Initio dengan basis set 6-31G**

1) 10 senyawa turunan flavon/flavonol

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R ( $\text{\AA}^3$ )	$\alpha$ ( $\text{\AA}^3$ )
1	Khrisin	-547793.944	-547793.944	-1373928.818	-	4.028	-8.80296	1.391072	-1.06	78.28	26.63
2	Galagin	-594744.4195	-594744.4195	-1515623.897	-	2.224	-8.43800	1.229153	-1.96	79.96	27.27
3	Apigenin	-594746.2585	-594746.2585	-1491627.7	-	4.929	-8.62704	1.483087	-2.09	79.88	27.27
4	Kaemferol	-641696.865	-641696.865	-1636644.64	-	3.766	-8.22504	1.287578	-2.99	81.56	27.90
5	luteolin	-641698.973	-641698.973	-1622385.944	-	4.357	-8.56756	1.358817	-3.11	81.49	27.90
6	quercetin	-688649.6346	-688649.6346	-1770818.739	-	4.358	-8.17176	1.162296	-4.01	83.17	28.54
7	morin	-735594.5414	-735594.5414	-1923738.617	-	4.036	-8.55639	1.60511	-5.04	84.77	29.18
8	acacetin	-619222.0715	-619222.0715	-1588160.571	-	5.644	-8.50130	1.543174	-2.06	84.65	29.10
9	diosmetin	-666168.974	-666168.974	-1724829.42	-	4.125	-8.63034	1.346622	-3.08	86.26	29.74
10	5,7-dihidroksi- 3',4'-dimetoksi flavon	-690644.9223	-690644.9223	-1830255.271	-	6.484	-8.49821	1.525633	-3.05	91.03	31.57

2) Senyawa turunan flavanon

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R ( $\text{\AA}^3$ )	$\alpha$ ( $\text{\AA}^3$ )
1	Taksifolin	-689373.4385	-689373.4385	-1799883.985	-	2.421	-8.52336	1.840034	-3.02	81.20	28.73
2	hesperitin	-666174.6315	-666174.6315	-1721776.424	-	7.228	-8.553537	1.582621	-2.09	77.51	29.74



3) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus alkoksi

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R ( $\text{\AA}^3$ )	$\alpha$ ( $\text{\AA}^3$ )
11	5,7-dihidroksi-3- metoksi flavon	-619215.1022	-619215.1022	-1629696.163	-	3.001	-8.59512	1.481674	-1.93	84.73	29.10
12	5,7-dihidroksi-8- metoksi flavon	-619212.7954	-619212.7954	-1627745.319	-	4.191	-8.5679	1.443936	-2.06	84.65	29.10
13	5,7-dihidroksi -3- etoksi flavon	-643703.6927	-643703.6927	-1738060.508	-	3.063	-8.59724	1.513738	-1.59	89.48	30.94
14	5,7-dihidroksi -8- etoksi flavon	-643699.5007	-643699.5007	-1741163.414	-	4.35	-8.57320	1.427037	-1.71	89.40	30.94
15	5,7-dihidroksi -3- propoksi flavon	-668188.2322	-668188.2322	-1841006.573	-	3.012	-8.58397	1.508725	-1.12	94.00	32.77
16	5,7-dihidroksi -8- propoksi flavon	-668184.6527	-668184.6527	-1849334.865	-	4.322	-8.55387	1.499574	-1.24	93.92	32.77
17	5,7-dihidroksi -3- isopropoksi flavon	-668191.0552	-668191.0552	-1861531.487	-	2.873	-8.53343	1.52495	-1.18	93.89	32.77
18	5,7-dihidroksi -8- isopropoksi flavon	-668188.5545	-668188.5545	-1861029.726	-	4.486	-8.53042	1.44631	-1.30	93.82	32.77
19	5,7-dihidroksi -3-t- butoksi flavon	-692674.6513	-692674.6513	-1991483.976	-	3.027	-8.54684	1.584566	-1.10	98.53	34.61
20	5,7-dihidroksi -8-t- butoksi flavon	-692660.5059	-692660.5059	-1994843.102	-	5.234	-8.12658	1.36082	-1.22	98.46	34.61

4) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus OH dan NH<sub>2</sub>

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R (Å <sup>3</sup> )	$\alpha$ (Å <sup>3</sup> )
21	5,7,8-trihidroksi flavon	-594736.6996	-594736.6996	-1513769.128	-	4.424	-8.472585	1.221557	-2.09	79.88	27.27
22	3-amina -5,7-dihidroksi - flavon	-575150.9333	-575150.9333	-1489094.64	-	1.869	-6.218359	4.929575	-2.66	81.90	27.98
23	8-amina -5,7-dihidroksi - flavon	-582308.4954	-582308.4954	-1500826.838	-	5.275	-7.577584	1.457164	-2.78	81.83	27.98

5) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus fluor dan klor

No	Senyawa	Et (kcal/mol)	Eb (kcal/mol)	Ee (kcal/mol)	$\Delta H_f$ (kcal/mol)	$\mu$ (D)	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	log P	R (Å <sup>3</sup> )	$\alpha$ (Å <sup>3</sup> )
24	5,7-dihidroksi -3-flouro flavon	-602218.2682	-602218.2682	-1516435.63	-	2.004	-6.542876	4.627047	-1.54	78.48	26.54
25	5,7-dihidroksi -8-flouro flavon	-602217.6083	-602217.6083	-1514487.475	-	1.79	-6.321437	4.676543	-1.66	78.41	26.54
26	5,7-dihidroksi -3-kloro flavon	-825952.9733	-825952.9733	-1814264.286	-	3.092	-6.890848	4.720178	-1.16	83.07	28.56
27	5,7-dihidroksi -8-kloro flavon	-825955.4418	-825955.4418	-1813706.409	-	1.759	-6.790104	4.51977	-1.28	82.99	28.56

## Lampiran 3

### Output hasil optimasi geometri

#### a. Optimasi menggunakan metode RM1

##### 1) Senyawa turunan flavon/flavonol

###### 1.1 Khrisin

HyperChem log start -- Fri May 17 12:02:40 2013.  
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule RM1  
PolakRibiere optimizer  
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
Accelerate convergence = NO  
Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 645  
ENERGIES AND GRADIENT  
Total Energy = -75904.8894847 (kcal/mol)  
Total Energy = -120.962126065 (a.u.)  
Binding Energy = -2326.4628847 (kcal/mol)  
Isolated Atomic Energy = -73578.4266000 (kcal/mol)  
Electronic Energy = -455367.2819130 (kcal/mol)  
Core-Core Interaction = 379462.3924283 (kcal/mol)  
Heat of Formation = 996.1431153 (kcal/mol)  
Gradient = 0.0917711 (kcal/mol/Ang)  
Dipole (Debyes) x y z Total  
Point-Chg. -2.176 2.329 0.719 3.267  
sp Hybrid 0.453 -0.112 -0.103 0.478  
pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
Sum -1.722 2.217 0.616 2.874  
HyperChem log stop -- Fri May 17 12:37:01 2013.

###### 1.2 Galagin

HyperChem log start -- Tue Jun 04 10:59:25 2013.  
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
RM1  
PolakRibiere optimizer  
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
Accelerate convergence = NO  
Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 420  
ENERGIES AND GRADIENT  
Total Energy = -83208.0741417 (kcal/mol)  
Total Energy = -132.600490196 (a.u.)  
Binding Energy = -2340.0654417 (kcal/mol)  
Isolated Atomic Energy = -80868.0087000 (kcal/mol)

Electronic Energy = -510029.7192706 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 426821.6451289 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1042.0995583 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0985011 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-2.205	1.141	0.331	2.505
sp Hybrid	0.809	-0.624	-0.477	1.128
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-1.396	0.517	-0.147	1.496

HyperChem log stop -- Tue Jun 04 11:30:12 2013.

### 1.3 Apigenin

HyperChem log start -- Sat Jun 15 11:27:25 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = YES  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435  
 ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	= -83211.3961069 (kcal/mol)			
Total Energy	= -132.605784084 (a.u.)			
Binding Energy	= -2343.3874069 (kcal/mol)			
Isolated Atomic Energy	= -80868.0087000 (kcal/mol)			
Electronic Energy	= -498369.6650277 (kcal/mol)			
Core-Core Interaction	= 415158.2689208 (kcal/mol)			
Heat of Formation	= 1038.7775931 (kcal/mol)			
Gradient	= 0.0992777 (kcal/mol/Ang)			

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-3.227	-1.142	0.272	3.434
sp Hybrid	-0.074	-0.197	-0.416	0.466
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-3.301	-1.338	-0.143	3.565

HyperChem log stop -- Sat Jun 15 11:58:15 2013.

### 1.4 Kaemferol

HyperChem log start -- Fri May 17 09:56:40 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 645

## ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -90514.5910595 (kcal/mol)  
 Total Energy = -144.244164622 (a.u.)  
 Binding Energy = -2357.0002595 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -88157.5908000 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -554874.0787380 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 464359.4876784 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1084.7237405 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0987722 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -2.557 0.960 0.031 2.731  
 sp Hybrid 0.194 -0.559 -0.835 1.023  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -2.363 0.401 -0.804 2.528  
 HyperChem log stop -- Fri May 17 10:30:52 2013.

## 1.5 Luteolin

HyperChem log start -- Sat Jun 15 11:33:42 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = YES  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435  
 ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -90516.3002039 (kcal/mol)  
 Total Energy = -144.246888317 (a.u.)  
 Binding Energy = -2358.7094039 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -88157.5908000 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -547490.3676173 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 456974.0674134 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1083.0145961 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0999725 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -2.542 -1.465 0.767 3.033  
 sp Hybrid 0.205 -0.818 -0.473 0.966  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -2.337 -2.283 0.294 3.280  
 HyperChem log stop -- Sat Jun 15 12:00:01 2013.

## 1.6 Quercetin

HyperChem log start -- Tue Jun 04 11:07:27 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 420  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -90514.5441029 (kcal/mol)  
 Total Energy = -144.244089792 (a.u.)  
 Binding Energy = -2356.9533029 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -88157.5908000 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -554875.5268297 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 464360.9827268 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1084.7706971 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0925032 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -2.543 0.896 0.126 2.699  
 sp Hybrid 0.205 -0.567 -0.803 1.004  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -2.338 0.329 -0.678 2.456  
 HyperChem log stop -- Tue Jun 04 11:37:07 2013.

## 1.7 Morin

HyperChem log start -- Tue Jun 04 11:27:30 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 420  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -97819.7980985 (kcal/mol)  
 Total Energy = -155.885751624 (a.u.)  
 Binding Energy = -2372.6251985 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -95447.1729000 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -613597.0288294 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 515777.2307309 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1128.6578015 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0975231 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -2.863 1.806 0.357 3.404  
 sp Hybrid -0.353 0.135 -1.103 1.166  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -3.216 1.941 -0.747 3.830  
 HyperChem log stop -- Tue Jun 04 11:57:46 2013.

## 1.8 Acacetin

HyperChem log start -- Fri May 31 10:49:28 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-86754.2481961	(kcal/mol)
Total Energy	=	-138.251677569	(a.u.)
Binding Energy	=	-2574.4954081	(kcal/mol)
Isolated Atomic Energy	=	-84179.7527880	(kcal/mol)
Electronic Energy	=	-538497.5521839	(kcal/mol)
Core-Core Interaction	=	451743.3039878	(kcal/mol)
Heat of Formation	=	1082.7635919	(kcal/mol)
Gradient	=	0.0956602	(kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-3.075	2.756	0.630	4.177
sp Hybrid	0.087	-0.130	-0.269	0.311
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-2.988	2.626	0.361	3.994

HyperChem log stop -- Fri May 31 11:30:13 2013.

## 1.9 Diosmetin

HyperChem log start -- Sat Jun 15 11:40:40 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-94057.1316046	(kcal/mol)
Total Energy	=	-149.889561630	(a.u.)
Binding Energy	=	-2587.7967166	(kcal/mol)
Isolated Atomic Energy	=	-91469.3348880	(kcal/mol)
Electronic Energy	=	-591353.8997277	(kcal/mol)
Core-Core Interaction	=	497296.7681231	(kcal/mol)
Heat of Formation	=	1129.0212834	(kcal/mol)
Gradient	=	0.0951455	(kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-2.812	-1.822	1.106	3.529
sp Hybrid	0.609	-0.565	-0.341	0.898

```
pd Hybrid      0.000  0.000  0.000  0.000
Sum            -2.203 -2.388  0.765  3.338
HyperChem log stop -- Sat Jun 15 12:10:38 2013.
```

### 1.10 5,7-dihidroksi-3', 4'-dimetoksi flavon

```
HyperChem log start -- Sat Jun 15 11:46:54 2013.
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule
RM1
PolakRibiere optimizer
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50
Accelerate convergence = YES
Optimization algorithm = Polak-Ribiere
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435
ENERGIES AND GRADIENT
Total Energy          = -97599.2360446 (kcal/mol)
Total Energy          = -155.534263661 (a.u.)
Binding Energy        = -2818.1570686 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy = -94781.0789760 (kcal/mol)
Electronic Energy     = -641066.4482803 (kcal/mol)
Core-Core Interaction  = 543467.2122357 (kcal/mol)
Heat of Formation     = 1173.7549314 (kcal/mol)
Gradient              = 0.0948699 (kcal/mol/Ang)
Dipole (Debyes)  x      y      z      Total
Point-Chg.      -3.277 -2.260  1.455  4.239
sp Hybrid        0.441 -0.242  0.019  0.503
pd Hybrid        0.000  0.000  0.000  0.000
Sum              -2.836 -2.502  1.473  4.059
HyperChem log stop -- Sat Jun 15 12:17:01 2013.
```

## 2) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus alkoksi

### 2.1 5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon

```
HyperChem log start -- Fri May 31 10:15:44 2013.
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule
RM1
PolakRibiere optimizer
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50
Accelerate convergence = NO
Optimization algorithm = Polak-Ribiere
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495
ENERGIES AND GRADIENT
Total Energy          = -86749.4183274 (kcal/mol)
Total Energy          = -138.243980684 (a.u.)
Binding Energy        = -2569.6655394 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy = -84179.7527880 (kcal/mol)
Electronic Energy     = -559874.7456588 (kcal/mol)
```



Core-Core Interaction = 473125.3273314 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1087.5934606 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0995079 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -1.601 1.423 1.576 2.659  
 sp Hybrid 0.543 -0.379 -0.046 0.664  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -1.058 1.044 1.530 2.133  
 HyperChem log stop -- Fri May 31 10:45:19 2013.

## 2.2 5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon

HyperChem log start -- Fri May 31 10:27:46 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit= 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -86749.3504343 (kcal/mol)  
 Total Energy = -138.243872490 (a.u.)  
 Binding Energy = -2569.5976463 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -84179.7527880 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -559559.3144197 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 472809.9639853 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1087.6613537 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0785198 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -2.033 2.451 -0.255 3.195  
 sp Hybrid 0.490 -0.162 -0.326 0.611  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -1.543 2.289 -0.580 2.821  
 HyperChem log stop -- Fri May 31 11:02:28 2013.

## 2.3 5,7-dihidroksi-2'-metoksi flavon

HyperChem log start -- Fri May 31 11:15:38 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -86752.4935089 (kcal/mol)

Total Energy = -138.248881297 (a.u.)  
 Binding Energy = -2572.7407209 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -84179.7527880 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -556952.5444703 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 470200.0509614 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1084.5182791 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0957386 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -2.974 3.034 1.397 4.472  
 sp Hybrid 0.206 0.233 -0.151 0.346  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -2.768 3.267 1.246 4.459  
 HyperChem log stop -- Fri May 31 11:45:52 2013.

#### 2.4 5,7-dihidroksi-3'-metoksi flavon

HyperChem log start -- Fri May 31 11:55:04 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -86753.4309172 (kcal/mol)  
 Total Energy = -138.250375152 (a.u.)  
 Binding Energy = -2573.6781292 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -84179.7527880 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -544556.5128671 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 457803.0819499 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1083.5808708 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.1006780 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -2.656 1.500 0.950 3.195  
 sp Hybrid 0.302 -0.444 -0.259 0.596  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -2.354 1.056 0.691 2.671  
 HyperChem log stop -- Fri May 31 12:26:22 2013.

#### 2.5 5,7-dihidroksi-5'-metoksi flavon

HyperChem log start -- Fri May 31 12:35:33 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm= Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-86753.2951277	(kcal/mol)	
Total Energy	=	-138.250158758	(a.u.)	
Binding Energy	=	-2573.5423397	(kcal/mol)	
Isolated Atomic Energy	=	-84179.7527880	(kcal/mol)	
Electronic Energy	=	-540588.4828160	(kcal/mol)	
Core-Core Interaction	=	453835.1876882	(kcal/mol)	
Heat of Formation	=	1083.7166603	(kcal/mol)	
Gradient	=	0.0909821	(kcal/mol/Ang)	
Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-2.281	3.093	0.512	3.877
sp Hybrid	0.238	0.206	-0.196	0.371
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-2.043	3.299	0.315	3.893

HyperChem log stop -- Fri May 31 13:07:59 2013.

## 2.6 5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon

HyperChem log start -- Tue May 21 11:00:58 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 540

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-90305.3498180	(kcal/mol)	
Total Energy	=	-143.910717520	(a.u.)	
Binding Energy	=	-2813.8529420	(kcal/mol)	
Isolated Atomic Energy	=	-87491.4968760	(kcal/mol)	
Electronic Energy	=	-607081.3070938	(kcal/mol)	
Core-Core Interaction	=	516775.9572758	(kcal/mol)	
Heat of Formation	=	1118.5000580	(kcal/mol)	
Gradient	=	0.0969915	(kcal/mol/Ang)	
Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-1.333	1.414	1.452	2.426
sp Hybrid	0.539	-0.401	-0.069	0.676
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-0.794	1.013	1.384	1.890

HyperChem log stop -- Tue May 21 11:30:58 2013.

## 2.7 5,7-dihidroksi-8-etoksi flavon

HyperChem log start -- Tue May 21 11:37:58 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 540

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-90305.1131108	(kcal/mol)
Total Energy	=	-143.910340303	(a.u.)
Binding Energy	=	-2813.6162348	(kcal/mol)
Isolated Atomic Energy	=	-87491.4968760	(kcal/mol)
Electronic Energy	=	-606249.1454049	(kcal/mol)
Core-Core Interaction	=	515944.0322941	(kcal/mol)
Heat of Formation	=	1118.7367652	(kcal/mol)
Gradient	=	0.0976460	(kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-2.069	2.587	-0.382	3.335
sp Hybrid	0.541	-0.157	-0.270	0.625
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-1.528	2.431	-0.652	2.944

HyperChem log stop -- Tue May 21 12:17:25 2013.

## 2.8 5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon

HyperChem log start -- Sat Jun 29 12:05:16 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence= NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 540

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-93861.0531699	(kcal/mol)
Total Energy	=	-149.577090793	(a.u.)
Binding Energy	=	-3057.8122059	(kcal/mol)
Isolated Atomic Energy	=	-90803.2409640	(kcal/mol)
Electronic Energy	=	-651683.3332541	(kcal/mol)
Core-Core Interaction	=	557822.2800842	(kcal/mol)
Heat of Formation	=	1149.6347941	(kcal/mol)
Gradient	=	0.0940073	(kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-1.194	1.438	1.455	2.369
sp Hybrid	0.526	-0.447	-0.084	0.696

```

pd Hybrid      0.000  0.000  0.000  0.000
Sum            -0.668  0.991  1.371  1.819
HyperChem log stop -- Sat Jun 29 12:35:26 2013.

```

## 2.9 5,7-dihidroksi-8-propoksi flavon

```

HyperChem log start -- Sat Jun 29 12:40:41 2013.
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule
RM1
PolakRibiere optimizer
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50
Accelerate convergence = NO
Optimization algorithm = Polak-Ribiere
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 540
ENERGIES AND GRADIENT
Total Energy          = -93859.3908607 (kcal/mol)
Total Energy          = -149.574441735 (a.u.)
Binding Energy        = -3056.1498967 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy = -90803.2409640 (kcal/mol)
Electronic Energy     = -655183.3682424 (kcal/mol)
Core-Core Interaction = 561323.9773817 (kcal/mol)
Heat of Formation     = 1151.2971033 (kcal/mol)
Gradient              = 0.0989425 (kcal/mol/Ang)
Dipole (Debyes)  x      y      z      Total
Point-Chg.      -1.972  2.865 -0.388  3.500
sp Hybrid        0.630 -0.039 -0.288  0.694
pd Hybrid        0.000  0.000  0.000  0.000
Sum              -1.343  2.826 -0.676  3.201
HyperChem log stop -- Sat Jun 29 13:10:05 2013.

```

## 2.10 5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon

```

HyperChem log start -- Sat Jun 29 13:21:12 2013.
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule
RM1
PolakRibiere optimizer
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50
Accelerate convergence = YES
Optimization algorithm = Polak-Ribiere
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 585
ENERGIES AND GRADIENT
Total Energy          = -93846.9851281 (kcal/mol)
Total Energy          = -149.554671944 (a.u.)
Binding Energy        = -3043.7441641 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy = -90803.2409640 (kcal/mol)
Electronic Energy     = -664116.7550911 (kcal/mol)
Core-Core Interaction = 570269.7699630 (kcal/mol)
Heat of Formation     = 1163.7028359 (kcal/mol)

```

Gradient = 0.0921491 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. 0.460 -0.057 -0.341 0.575  
 sp Hybrid 0.450 -0.214 -0.351 0.610  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum 0.910 -0.271 -0.692 1.175  
 HyperChem log stop -- Sat Jun 29 13:52:16 2013.

### 2.11 5,7-dihidroksi-8-isopropoksi flavon

HyperChem log start -- Sat Jun 29 14:01:09 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = YES  
 Optimization algorithm= Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 585  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -93843.7553009 (kcal/mol)  
 Total Energy = -149.549524888 (a.u.)  
 Binding Energy = -3040.5143369 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -90803.2409640 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -650036.6703551 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 556192.9150542 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1166.9326631 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0962075 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -1.687 2.210 -0.534 2.831  
 sp Hybrid 0.495 -0.730 -0.138 0.893  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -1.192 1.480 -0.673 2.016  
 HyperChem log stop -- Sat Jun 29 14:30:46 2013.

### 2.12 5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon

HyperChem log start -- Sat Jun 29 12:35:55 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = YES  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 585  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -97419.1205741 (kcal/mol)  
 Total Energy = -155.247231423 (a.u.)  
 Binding Energy = -3304.1355221 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -94114.9850520 (kcal/mol)

Electronic Energy = -719715.8178565 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 622296.6972824 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1178.4054779 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0998531 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-1.020	1.394	1.705	2.427
sp Hybrid	0.517	-0.388	-0.062	0.650
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-0.503	1.006	1.643	1.991

HyperChem log stop -- Sat Jun 29 13:05:51 2013.

### 2.13 5,7-dihidroksi-8-t-butoksi flavon

HyperChem log start -- Sat Jun 29 13:10:04 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = YES  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 585  
 ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-97421.2488872	(kcal/mol)
Total Energy	=	-155.250623106	(a.u.)
Binding Energy	=	-3306.2638352	(kcal/mol)
Isolated Atomic Energy	=	-94114.9850520	(kcal/mol)
Electronic Energy	=	-721563.4076770	(kcal/mol)
Core-Core Interaction	=	624142.1587898	(kcal/mol)
Heat of Formation	=	1176.2771648	(kcal/mol)
Gradient	=	0.0914948	(kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-2.064	2.760	-0.154	3.450
sp Hybrid	0.445	-0.148	-0.393	0.612
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-1.619	2.613	-0.547	3.122

HyperChem log stop -- Sat Jun 29 13:45:51 2013.

## 3) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus OH dan NH<sub>2</sub>

### 3.1 5,7,8-trihidroksi flavon

HyperChem log start -- Thu Jul 18 10:40:03 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450

#### ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-83206.4248437	(kcal/mol)	
Total Energy	=	-132.597861873	(a.u.)	
Binding Energy	=	-2338.4161437	(kcal/mol)	
Isolated Atomic Energy	=	-80868.0087000	(kcal/mol)	
Electronic Energy	=	-509219.8780970	(kcal/mol)	
Core-Core Interaction	=	426013.4532532	(kcal/mol)	
Heat of Formation	=	1043.7488563	(kcal/mol)	
Gradient	=	0.0957576	(kcal/mol/Ang)	
Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-2.044	2.068	-0.187	2.913
sp Hybrid	0.134	-0.421	-0.468	0.644
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-1.910	1.647	-0.655	2.606

HyperChem log stop -- Thu Jul 18 11:10:51 2013.

### 3.2 5,7,2'-trihidroksi flavon

HyperChem log start -- Thu Jul 18 10:49:36 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450

#### ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-83209.7623095	(kcal/mol)	
Total Energy	=	-132.603180462	(a.u.)	
Binding Energy	=	-2341.7536095	(kcal/mol)	
Isolated Atomic Energy	=	-80868.0087000	(kcal/mol)	
Electronic Energy	=	-509229.9939156	(kcal/mol)	
Core-Core Interaction	=	426020.2316061	(kcal/mol)	
Heat of Formation	=	1040.4113905	(kcal/mol)	
Gradient	=	0.0966330	(kcal/mol/Ang)	
Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-2.410	3.078	1.109	4.063
sp Hybrid	-0.042	0.475	-0.245	0.536
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-2.452	3.553	0.864	4.402

HyperChem log stop -- Thu Jul 18 11:20:48 2013.

### 3.3 5,7,3'-trihidroksi flavon

HyperChem log start -- Thu Jul 18 10:54:16 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1



PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -83210.5715064 (kcal/mol)  
 Total Energy = -132.604469999 (a.u.)  
 Binding Energy = -2342.5628064 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -80868.0087000 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -500616.9647122 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 417406.3932058 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1039.6021936 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.1010119 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -1.987 1.590 0.778 2.661  
 sp Hybrid 0.104 -0.676 -0.414 0.800  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -1.883 0.914 0.364 2.125  
 HyperChem log stop -- Thu Jul 18 11:25:33 2013.

### 3.4 5,7,5'-trihidroksi flavon

HyperChem log start -- Thu Jul 18 11:30:28 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -83210.3239233 (kcal/mol)  
 Total Energy = -132.604075451 (a.u.)  
 Binding Energy = -2342.3152233 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -80868.0087000 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -499958.9641710 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 416748.6402477 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 1039.8497767 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.1007817 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -2.616 2.462 0.375 3.612  
 sp Hybrid 0.131 0.546 -0.140 0.578  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -2.485 3.007 0.235 3.909  
 HyperChem log stop -- Thu Jul 18 12:02:32 2013.

### 3.5 3-amina-5,7-dihidroksi flavon

HyperChem log start -- Wed Jul 17 07:15:02 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 465

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -81071.8866714 (kcal/mol)  
 Total Energy = -129.196259193 (a.u.)  
 Binding Energy = -2562.9260274 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -78508.9606440 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -507257.3403415 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 426185.4536701 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 924.7819726 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0980777 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-0.754	1.916	0.037	2.059
sp Hybrid	0.810	0.087	-0.341	0.883
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	0.056	2.003	-0.304	2.026

HyperChem log stop -- Wed Jul 17 07:45:20 2013.

### 3.6 8-amina-5,7-dihidroksi flavon

HyperChem log start -- Wed Jul 17 07:52:02 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 465

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -81068.8115602 (kcal/mol)  
 Total Energy = -129.191358692 (a.u.)  
 Binding Energy = -2559.8509162 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -78508.9606440 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -506273.1015626 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 425204.2900024 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 927.8570838 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0940621 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-3.278	2.660	1.009	4.340
sp Hybrid	0.100	0.123	0.163	0.227

```
pd Hybrid      0.000  0.000  0.000  0.000
Sum            -3.178  2.782  1.172  4.384
HyperChem log stop -- Wed Jul 17 08:21:35 2013.
```

### 3.7 2'-amina-5,7-dihidroksi flavon

```
HyperChem log start -- Wed Jul 17 08:28:03 2013.
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule
RM1
PolakRibiere optimizer
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50
Accelerate convergence = NO
Optimization algorithm = Polak-Ribiere
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 465
ENERGIES AND GRADIENT
Total Energy          = -81075.0792275 (kcal/mol)
Total Energy          = -129.201346854 (a.u.)
Binding Energy        = -2566.1185835 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy = -78508.9606440 (kcal/mol)
Electronic Energy     = -505880.7530370 (kcal/mol)
Core-Core Interaction = 424805.6738095 (kcal/mol)
Heat of Formation     = 921.5894165 (kcal/mol)
Gradient              = 0.0947846 (kcal/mol/Ang)
Dipole (Debyes)  x      y      z      Total
Point-Chg.      -3.085  2.078  0.285  3.731
sp Hybrid        -0.005  -0.346 -0.382  0.515
pd Hybrid        0.000  0.000  0.000  0.000
Sum              -3.090  1.732 -0.098  3.544
HyperChem log stop -- Wed Jul 17 08:58:05 2013.
```

### 3.8 3'-amina-5,7-dihidroksi flavon

```
HyperChem log start -- Wed Jul 17 09:04:00 2013.
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule
RM1
PolakRibiere optimizer
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50
Accelerate convergence = NO
Optimization algorithm = Polak-Ribiere
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 465
ENERGIES AND GRADIENT
Total Energy          = -81074.3668478 (kcal/mol)
Total Energy          = -129.200211605 (a.u.)
Binding Energy        = -2565.4062038 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy = -78508.9606440 (kcal/mol)
Electronic Energy     = -498099.9616658 (kcal/mol)
Core-Core Interaction = 417025.5948180 (kcal/mol)
Heat of Formation     = 922.3017962 (kcal/mol)
```

Gradient = 0.0963682 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -3.158 3.032 0.631 4.423  
 sp Hybrid -0.018 0.116 -0.248 0.274  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -3.176 3.148 0.383 4.489  
 HyperChem log stop -- Wed Jul 17 09:34:14 2013.

### 3.9 4'-amina-5,7-dihidroksi flavon

HyperChem log start -- Wed Jul 17 09:40:09 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 465  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -81076.1286728 (kcal/mol)  
 Total Energy = -129.203019251 (a.u.)  
 Binding Energy = -2567.1680288 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -78508.9606440 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -495813.7180272 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 414737.5893544 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 920.5399712 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0993119 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -2.375 4.370 1.096 5.093  
 sp Hybrid 0.386 0.408 -0.007 0.562  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -1.989 4.778 1.089 5.289  
 HyperChem log stop -- Wed Jul 17 10:10:52 2013.

### 3.10 5'-amina-5,7-dihidroksi flavon

HyperChem log start -- Wed Jul 17 10:16:51 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 465  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -81074.3039191 (kcal/mol)  
 Total Energy = -129.200111322 (a.u.)  
 Binding Energy = -2565.3432751 (kcal/mol)

Isolated Atomic Energy = -78508.9606440 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -497485.3222827 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 416411.0183636 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 922.3647249 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0912266 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -1.296 3.173 1.270 3.655  
 sp Hybrid 0.843 0.138 0.100 0.860  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -0.453 3.311 1.370 3.612  
 HyperChem log stop -- Wed Jul 17 10:36:14 2013.

#### 4) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus fluor dan klor

##### 4.1 5,7-dihidroksi-3-fluoro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 07:55:50 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -86825.2830892 (kcal/mol)  
 Total Energy = -138.364878863 (a.u.)  
 Binding Energy = -2387.5468942 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -84437.7361950 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -513502.6780357 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 426677.3949465 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 901.8471058 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0962801 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -3.453 1.094 0.995 3.756  
 sp Hybrid 0.551 -0.063 -0.154 0.576  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -2.902 1.031 0.841 3.192  
 HyperChem log stop -- Tue Jul 16 08:25:26 2013.

##### 4.2 5,7-dihidroksi-8-fluoro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 08:32:13 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(Å mol) Maximum cycles = 435

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -86825.6067788 (kcal/mol)  
 Total Energy = -138.365394695 (a.u.)  
 Binding Energy = -2387.8705838 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -84437.7361950 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -512725.5428576 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 425899.9360789 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 901.5234162 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.1153051 (kcal/mol/Å)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-0.741	1.733	0.177	1.893
sp Hybrid	0.364	-0.093	-0.061	0.380
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-0.377	1.640	0.117	1.686

HyperChem log stop -- Tue Jul 16 09:02:56 2013.

#### 4.3 5,7-dihidroksi-2'-fluoro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 09:08:07 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(Å mol) Maximum cycles = 435

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -86828.6256185 (kcal/mol)  
 Total Energy = -138.370205522 (a.u.)  
 Binding Energy = -2390.8894235 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -84437.7361950 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -512748.9914822 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 425920.3658637 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 898.5045765 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.1000614 (kcal/mol/Å)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-1.143	2.948	1.514	3.505
sp Hybrid	0.385	-0.118	-0.186	0.443
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-0.758	2.830	1.329	3.217

HyperChem log stop -- Tue Jul 16 09:38:42 2013.

#### 4.4 5,7-dihidroksi-3'-fluoro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 09:43:23 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -86829.2557560 (kcal/mol)  
 Total Energy = -138.371209709 (a.u.)  
 Binding Energy = -2391.5195610 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -84437.7361950 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -503751.1624659 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 416921.9067099 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 897.8744390 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0972555 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-0.789	1.175	1.207	1.860
sp Hybrid	0.376	-0.034	-0.136	0.401
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-0.413	1.141	1.070	1.618

HyperChem log stop -- Tue Jul 16 10:24:52 2013.

#### 4.5 5,7-dihidroksi-4'-fluoro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 10:30:19 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -86829.8158787 (kcal/mol)  
 Total Energy = -138.372102322 (a.u.)  
 Binding Energy = -2392.0796837 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -84437.7361950 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -501533.2371742 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 414703.4212956 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 897.3143163 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0992251 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-1.990	0.466	0.399	2.082
sp Hybrid	0.444	0.019	-0.080	0.452

```
pd Hybrid      0.000  0.000  0.000  0.000
Sum            -1.546  0.486  0.319  1.651
HyperChem log stop -- Tue Jul 16 11:01:27 2013.
```

#### 4.6 5,7-dihidroksi-5'-fluoro flavon

```
HyperChem log start -- Tue Jul 16 11:07:21 2013.
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule
RM1
PolakRibiere optimizer
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50
Accelerate convergence = NO
Optimization algorithm = Polak-Ribiere
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435
ENERGIES AND GRADIENT
Total Energy          = -86829.2478324 (kcal/mol)
Total Energy          = -138.371197083 (a.u.)
Binding Energy        = -2391.5116374 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy = -84437.7361950 (kcal/mol)
Electronic Energy     = -503162.3412071 (kcal/mol)
Core-Core Interaction = 416333.0933746 (kcal/mol)
Heat of Formation     = 897.8823626 (kcal/mol)
Gradient              = 0.0966778 (kcal/mol/Ang)
Dipole (Debyes)  x      y      z      Total
Point-Chg.      -3.345  1.137 -0.212  3.540
sp Hybrid        0.526 -0.035 -0.043  0.529
pd Hybrid        0.000  0.000  0.000  0.000
Sum              -2.819  1.102 -0.255  3.037
HyperChem log stop -- Tue Jul 16 11:38:21 2013.
```

#### 4.7 5,7-dihidroksi-3-kloro flavon

```
HyperChem log start -- Tue Jul 16 11:41:06 2013.
Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule
RM1
PolakRibiere optimizer
Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50
Accelerate convergence = NO
Optimization algorithm = Polak-Ribiere
Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435
ENERGIES AND GRADIENT
Total Energy          = -84426.5494912 (kcal/mol)
Total Energy          = -134.542254025 (a.u.)
Binding Energy        = -2527.6679692 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy = -81898.8815220 (kcal/mol)
Electronic Energy     = -506957.7733775 (kcal/mol)
Core-Core Interaction = 422531.2238863 (kcal/mol)
Heat of Formation     = 771.8260308 (kcal/mol)
```



Gradient = 0.0999796 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-3.498	1.227	1.055	3.854
sp Hybrid	0.662	0.050	-0.185	0.689
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-2.836	1.277	0.870	3.230

HyperChem log stop -- Tue Jul 16 12:11:12 2013.

#### 4.8 5,7-dihidroksi-8-kloro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 12:17:16 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-84426.0283469 (kcal/mol)
Total Energy	=	-134.541423528 (a.u.)
Binding Energy	=	-2527.1468249 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy	=	-81898.8815220 (kcal/mol)
Electronic Energy	=	-506187.4291719 (kcal/mol)
Core-Core Interaction	=	421761.4008250 (kcal/mol)
Heat of Formation	=	772.3471751 (kcal/mol)
Gradient	=	0.1009319 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-0.643	1.691	0.205	1.820
sp Hybrid	0.211	-0.001	-0.009	0.211
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-0.432	1.690	0.196	1.755

HyperChem log stop -- Tue Jul 16 12:38:26 2013.

#### 4.9 5,7-dihidroksi-2'-kloro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 12:46:36 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-84428.6030190 (kcal/mol)
Total Energy	=	-134.545526529 (a.u.)
Binding Energy	=	-2529.7214970 (kcal/mol)

Isolated Atomic Energy = -81898.8815220 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -506388.4256009 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 421959.8225819 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 769.7725030 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0952964 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -0.890 2.908 2.124 3.710  
 sp Hybrid 0.246 -0.180 -0.363 0.474  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -0.643 2.728 1.762 3.310  
 HyperChem log stop -- Tue Jul 16 13:16:45 2013.

#### 4.10 5,7-dihidroksi-3'-kloro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 13:23:53 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435  
 ENERGIES AND GRADIENT  
 Total Energy = -84429.8912293 (kcal/mol)  
 Total Energy = -134.547579423 (a.u.)  
 Binding Energy = -2531.0097073 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -81898.8815220 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -497563.0996092 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 413133.2083799 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 768.4842927 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0989939 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -0.385 0.899 1.369 1.682  
 sp Hybrid 0.213 0.070 -0.204 0.303  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -0.172 0.969 1.165 1.525  
 HyperChem log stop -- Tue Jul 16 13:53:44 2013.

#### 4.11 5,7-dihidroksi-4'-kloro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 14:00:47 2013.  
 Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
 RM1  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = NO  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

## ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -84430.1362441 (kcal/mol)  
 Total Energy = -134.547969878 (a.u.)  
 Binding Energy = -2531.2547221 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -81898.8815220 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -495373.3048588 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 410943.1686147 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 768.2392779 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0974000 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -1.928 -0.141 0.286 1.955  
 sp Hybrid 0.425 0.216 -0.048 0.479  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -1.504 0.075 0.238 1.524  
 HyperChem log stop -- Tue Jul 16 14:30:42 2013.

## 4.12 5,7-dihidroksi-5'-kloro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 16 14:36:43 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule  
RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

## ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -84429.9107569 (kcal/mol)  
 Total Energy = -134.547610542 (a.u.)  
 Binding Energy = -2531.0292349 (kcal/mol)  
 Isolated Atomic Energy = -81898.8815220 (kcal/mol)  
 Electronic Energy = -496947.2441152 (kcal/mol)  
 Core-Core Interaction = 412517.3333583 (kcal/mol)  
 Heat of Formation = 768.4647651 (kcal/mol)  
 Gradient = 0.0951207 (kcal/mol/Ang)  
 Dipole (Debyes) x y z Total  
 Point-Chg. -3.675 0.846 -0.433 3.795  
 sp Hybrid 0.668 0.073 0.056 0.674  
 pd Hybrid 0.000 0.000 0.000 0.000  
 Sum -3.007 0.919 -0.376 3.166  
 HyperChem log stop -- Tue Jul 16 15:05:21 2013.

## 5) Senyawa hesperitin

HyperChem log start -- Fri May 17 10:24:30 2013.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule

RM1

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = NO

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 645

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-94727.3570537 (kcal/mol)
Total Energy	=	-150.957633737 (a.u.)
Binding Energy	=	-2732.4158537 (kcal/mol)
Isolated Atomic Energy	=	-91994.9412000 (kcal/mol)
Electronic Energy	=	-609553.7806985 (kcal/mol)
Core-Core Interaction	=	514826.4236447 (kcal/mol)
Heat of Formation	=	1088.6061463 (kcal/mol)
Gradient	=	0.0987136 (kcal/mol/Ang)

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-2.766	-1.453	-0.036	3.125
sp Hybrid	-0.377	0.275	0.395	0.612
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-3.143	-1.178	0.360	3.376

HyperChem log stop -- Fri May 17 10:55:30 2013.

## b. Optimasi menggunakan metode Ab Initio

### (1) Senyawa turunan flavon/flavonol

#### 1.1 Khrisin

HyperChem log start -- Mon Jul 01 10:08:18 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-547793.9439597 (kcal/mol)
Total Energy	=	-872.965108791 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	548181.2332012 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	873.582293407 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993

eK, ee and eN Energy = -1373928.8179719 (kcal/mol)  
 Nuclear Repulsion Energy = 826134.8740122 (kcal/mol)  
 RMS Gradient = 0.1003923 (kcal/mol/Ang)  
 Net Charge (Electrons):  
 -0.0000

Dipole Moment (Debye):  
 X: -2.4934 Y: 3.1273 Z: 0.4769 Ttl: 4.0280

Quadrupole Moment (Debye-Ang):  
 XX: -108.8734 YY: -84.9241 ZZ: -114.0228  
 XY: 9.0330 XZ: 1.2990 YZ: 3.7878

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):  
 XXX: 434.5527 YYY: -125.3917 ZZZ: -24.7481  
 XYY: 62.9173 XXY: -67.4282 XXZ: -6.1402  
 XZZ: 152.8211 YZZ: -79.6612 YYZ: 8.6345 XYZ: -13.1070

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):  
 XXXX: -2966.7234 YYYY: -5237.2149 ZZZZ: -237.9408  
 XXXY: 10.6471 XXXZ: 3.3670 YYYYX: 230.7562  
 YYYYZ: -235.8025 ZZZX: 9.1430 ZZZY: -453.6729  
 XXYX: -1126.6479 XXZZ: -532.0490 YYZZ: -1160.1516  
 XXYZ: -80.7183 YYXZ: 23.0586 ZZXY: 21.1366

HyperChem log stop -- Mon Jul 01 17:47:45 2013.

## 1.2 Galagin

HyperChem log start -- Mon Jul 01 10:28:29 2013.

eometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -594744.4195311 (kcal/mol)  
 Total Energy = -947.785444917 (a.u.)  
 Electronic Kinetic Energy = 595128.8434440 (kcal/mol)  
 Electronic Kinetic Energy = 948.398063342 (a.u.)  
 The Virial (-V/T) = 1.9994  
 eK, ee and eN Energy = -1515623.8965783 (kcal/mol)  
 Nuclear Repulsion Energy = 920879.4770473 (kcal/mol)  
 RMS Gradient = 0.0995375 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):  
-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X: -2.1654 Y: 0.5053 Z: 0.0389 Ttl: 2.2239

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -110.8912 YY: -97.3928 ZZ: -118.9700  
XY: 8.0521 XZ: -0.2894 YZ: 2.9678

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX: 417.1248 YYY: -168.8254 ZZZ: -41.9556  
XYY: 49.9661 XXY: -84.2502 XXZ: -9.5434  
XZZ: 141.7499 YZZ: -85.5842 YYZ: -5.4200 XYZ: -19.6327

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -2998.1072 YYYY: -5411.1825 ZZZZ: -258.9618  
XXXZ: -3.5258 YYYX: 219.2002  
YYYZ: -278.0639 ZZZX: 14.2223 ZZZY: -474.2369  
XXYY: -1178.4319 XXZZ: -543.9373 YYZZ: -1171.1920  
XXYZ: -74.0838 YYXZ: 8.2402 ZZXY: 2.5698

HyperChem log stop -- Tue Jul 02 08:31:27 2013.

### 1.3 Apigenin

HyperChem log start -- Mon Jul 01 11:49:15 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -594746.2585490 (kcal/mol)  
Total Energy = -947.788375578 (a.u.)  
Electronic Kinetic Energy = 595131.1906230 (kcal/mol)  
Electronic Kinetic Energy = 948.401803809 (a.u.)  
The Virial (-V/T) = 1.9994  
eK, ee and eN Energy = -1491627.7001503 (kcal/mol)  
Nuclear Repulsion Energy = 896881.4416013 (kcal/mol)  
RMS Gradient = 0.0958892 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):  
-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X: -4.1073 Y: 2.6807 Z: 0.4927 Ttl: 4.9294

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -107.1949 YY: -98.2459 ZZ: -119.2157  
XY: -2.8245 XZ: -0.5503 YZ: 3.0705

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX: 434.6585 YYY: -308.3637 ZZZ: -45.0337  
XYY: -17.0516 XXY: -46.5109 XXZ: -4.5231  
XZZ: 157.0882 YZZ: -112.5161 YYZ: -6.6253 XYZ: -27.4954

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -2972.7740 YYYY: -7534.6578 ZZZZ: -288.7767  
XXXY: -2.4324 XXXZ: 12.8254 YYYYX: -247.0568  
YYYZ: -452.1754 ZZZX: 41.0710 ZZZY: -593.4574  
XXYY: -1010.7749 XXZZ: -540.2652 YYZZ: -1435.6800  
XXYZ: -64.4350 YYXZ: -66.0939 ZZXY: 54.1676

HyperChem log stop -- Tue Jul 02 08:35:14 2013.

#### 1.4 Kaemferol

HyperChem log start -- Tue Jul 02 08:32:38 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -641696.8649770 (kcal/mol)

Total Energy = -1022.608920238 (a.u.)

Electronic Kinetic Energy = 642080.6320176 (kcal/mol)

Electronic Kinetic Energy = 1023.220491870 (a.u.)

The Virial (-V/T) = 1.9994

eK, ee and eN Energy = -1636644.6396875 (kcal/mol)

Nuclear Repulsion Energy = 994947.7747104 (kcal/mol)

RMS Gradient = 0.0935784 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X: -3.7586 Y: -0.0375 Z: 0.2361 Ttl: 3.7662

## Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -108.7016	YY: -112.4926	ZZ: -123.5385
XY: -3.1187	XZ: -2.3936	YZ: 4.0526

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX: 423.9499	YYY: -371.0169	ZZZ: -46.8884	
XYY: -18.4298	XXY: -64.1538	XXZ: -3.1854	
XZZ: 148.0228	YZZ: -115.5182	YYZ: -4.9691	XYZ: -38.1395

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -3050.6047	YYYY: -7889.9770	ZZZZ: -293.2107
XXXZ: -10.5308	YYYX: -161.9808	
YYYZ: -382.8511	ZZZX: 27.6345	ZZZY: -579.3474
XXYY: -1062.3087	XXZZ: -556.0845	YYZZ: -1411.8045
XXYZ: -35.9698	YYXZ: -102.7614	ZZXY: 36.5733

HyperChem log stop -- Wed Jul 03 08:56:10 2013.

## 1.5 Luteolin

HyperChem log start -- Tue Jul 02 08:36:56 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

## ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-641698.9729638 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1022.612279528 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	642083.8185664 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1023.225569958 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9994
eK, ee and eN Energy	=	-1622385.9436941 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	980686.9707303 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0913962 (kcal/mol/Ang)
Net Charge (Electrons):		-0.0000

## Dipole Moment (Debye):

X: -4.2940	Y: 0.7212	Z: 0.1556	Ttl: 4.3569
------------	-----------	-----------	-------------

## Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -107.8150	YY: -123.1443	ZZ: -124.7721
XY: 3.8628	XZ: 0.5662	YZ: 0.0770



Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	449.8288	YYY:	-537.5253	ZZZ:	-54.9043
XYY:	74.9371	XXY:	-77.0523	XXZ:	-9.4509
XZZ:	176.6863	YZZ:	-138.3885	YYZ:	-35.3612
				XYZ:	-15.3461

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-3144.3815	YYYY:	-9550.3005	ZZZZ:	-303.9442
XXXY:	226.4048	XXXZ:	40.2510	YYYYX:	690.5213
YYYZ:	-685.4832	ZZZX:	79.0743	ZZZY:	-648.2276
XXYY:	-1429.2730	XXZZ:	-619.7832	YYZZ:	-1604.8415
XXYZ:	-115.0698	YYXZ:	48.9395	ZZXY:	167.6552

HyperChem log stop -- Wed Jul 03 08:37:09 2013.

## 1.6 Quercetin

HyperChem log start -- Tue Jul 02 11:38:49 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

## ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-688649.6346097 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1097.432912183 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	689036.7354143 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1098.049796505 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9994
eK, ee and eN Energy	=	-1770818.7391061 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1082169.1044964 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0923677 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

0.0000

## Dipole Moment (Debye):

X:	-3.8790	Y:	-1.9781	Z:	-0.1858	Ttl:	4.3583
----	---------	----	---------	----	---------	------	--------

## Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-109.5769	YY:	-136.2121	ZZ:	-129.9398
XY:	3.7971	XZ:	0.0434	YZ:	-0.7501

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	437.7491	YYY:	-596.8507	ZZZ:	-57.3253
XYY:	72.0594	XXY:	-100.4563	XXZ:	-10.8979

XZZ: 169.4442 YZZ: -147.1798 YYZ: -39.8485 XYZ: -16.2820

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -3230.9795 YYY: -9789.5402 ZZZ: -310.5650  
 XXXY: 258.0489 XXXZ: 40.0642 YYYX: 756.3091  
 YYYZ: -713.4737 ZZZX: 82.5589 ZZZY: -654.7665  
 XXY: -1492.2499 XXZ: -645.4385 YYZ: -1613.9338  
 XXYZ: -115.8427 YYX: 52.5029 ZZY: 163.4127

HyperChem log stop -- Wed Jul 03 09:05:20 2013.

## 1.7 Morin

HyperChem log start -- Wed Jul 03 09:02:52 2013

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -735594.5413850 (kcal/mol)  
 Total Energy = -1172.244373869 (a.u.)  
 Electronic Kinetic Energy = 735978.5504850 (kcal/mol)  
 Electronic Kinetic Energy = 1172.856331247 (a.u.)  
 The Virial (-V/T) = 1.9995  
 eK, ee and eN Energy = -1923738.6166671 (kcal/mol)  
 Nuclear Repulsion Energy = 1188144.0752821 (kcal/mol)  
 RMS Gradient = 0.0917667 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

0.0000

Dipole Moment (Debye):

X: -3.8542 Y: 0.9895 Z: 0.6729 Ttl: 4.0357

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -116.1943 YY: -115.7046 ZZ: -134.5694  
 XY: -9.2929 XZ: 3.5273 YZ: -2.6821

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX: 484.7645 YYY: -493.4030 ZZZ: -69.9434  
 XXY: -2.6076 XYY: -76.2347 XXZ: -26.7472  
 XZZ: 194.4358 YZZ: -163.6827 YYZ: -34.0431 XYZ: -5.6167

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -3175.3030 YYY: -8902.6444 ZZZ: -644.3305  
 XXXY: 178.9661 XXXZ: 193.3549 YYYX: 280.1282  
 YYYZ: -833.7601 ZZZX: 219.0649 ZZZY: -636.4161  
 XXYY: -1284.2473 XXZZ: -686.1889 YYZZ: -1844.8615  
 XXYZ: -114.1864 YYXZ: 61.6987 ZZXY: 238.8148

HyperChem log stop -- Thu Jul 04 08:27:57 2013.

## 1.8 Acacetin

HyperChem log start -- Mon Jul 08 10:22:04 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -619222.0714992 (kcal/mol)  
 Total Energy = -986.793061465 (a.u.)  
 Electronic Kinetic Energy = 619633.7041897 (kcal/mol)  
 Electronic Kinetic Energy = 987.449039831 (a.u.)  
 The Virial (-V/T) = 1.9993  
 eK, ee and eN Energy = -1588160.5707459 (kcal/mol)  
 Nuclear Repulsion Energy = 968938.4992468 (kcal/mol)  
 RMS Gradient = 0.0995649 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X: -4.3302 Y: 3.5549 Z: 0.6856 Ttl: 5.6443

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -114.2300 YY: -95.0434 ZZ: -125.2050  
 XY: -4.7798 XZ: -1.0630 YZ: 5.0420

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX: 447.9074 YYY: -305.4116 ZZZ: -56.1096  
 XYY: -39.0308 XXY: -75.2342 XXZ: -7.1600  
 XZZ: 159.1391 YZZ: -142.2933 YYZ: 8.5426 XYZ: -32.9684

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -3082.2688 YYY: -8574.0062 ZZZ: -357.3902  
 XXXY: 333.5656 XXXZ: 57.3640 YYYX: -128.8911

YYYZ: -432.5339 ZZZX: 83.0052 ZZZY: -759.4617  
 XXYY: -1367.8158 XXZZ: -563.8376 YYZZ: -1764.3079  
 XXYZ: -117.0579 YYXZ: -91.4520 ZZXY: 152.5490  
 HyperChem log stop -- Tue Jul 09 09:53:42 2013.

## 1.9 Diosmetin

HyperChem log start -- Sun Jul 07 11:24:04 2013.  
 Geometry optimization, AbInitio, molecule  
 AbInitio  
 PolakRibiere optimizer  
 Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50  
 Accelerate convergence = YES  
 Optimization algorithm = Polak-Ribiere  
 Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450  
 The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.  
 HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.  
 Shell Types: S, S=P.

### ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -666168.9739891 (kcal/mol)  
 Total Energy = -1061.607703524 (a.u.)  
 Electronic Kinetic Energy = 666586.8962522 (kcal/mol)  
 Electronic Kinetic Energy = 1062.273704961 (a.u.)  
 The Virial (-V/T) = 1.9994  
 eK, ee and eN Energy = -1724829.4203992 (kcal/mol)  
 Nuclear Repulsion Energy = 1058660.4464101 (kcal/mol)  
 RMS Gradient = 0.0944286 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):  
 -0.0000

Dipole Moment (Debye):  
 X: -3.7715 Y: 0.9837 Z: 1.3508 Ttl: 4.1251

Quadrupole Moment (Debye-Ang):  
 XX: -118.8055 YY: -123.4545 ZZ: -127.2547  
 XY: 6.8381 XZ: 0.5852 YZ: 11.8994

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):  
 XXX: 497.0438 YYY: -610.9751 ZZZ: -46.2990  
 XYY: 98.1481 XXY: -142.7532 XXZ: -18.6049  
 XZZ: 180.0356 YZZ: -155.0771 YYZ: 70.2687 XYZ: -25.3663

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):  
 XXXX: -3378.6030 YYYY: -11083.9318 ZZZZ: -338.5045  
 XXXY: 726.2453 XXXZ: 116.1602 YYYYX: 1145.3829  
 YYYZ: 89.8995 ZZZX: 70.2917 ZZZY: -646.1072  
 XXYY: -1986.5543 XXZZ: -640.2379 YYZZ: -1781.3592  
 XXYZ: -161.1041 YYXZ: -123.5264 ZZXY: 246.4178

HyperChem log stop -- Mon Jul 08 10:20:17 2013.

## 1.10 5,7-dihidroksi-3', 4'-dimetoksi flavon

HyperChem log start -- Mon Jun 24 14:14:05 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 555

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-690644.9223186 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1100.612605151 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	691083.1098319 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1101.310901316 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9994
eK, ee and eN Energy	=	-1830255.2713301 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1139610.3490115 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0942775 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-4.8050	Y:	3.7217	Z:	2.2597	Ttl:	6.4842
----	---------	----	--------	----	--------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-125.8899	YY:	-101.0504	ZZ:	-133.9770
XY:	-6.8362	XZ:	0.8481	YZ:	16.6553

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	398.2283	YYY:	-474.7317	ZZZ:	-62.4680		
XYY:	-55.3139	XXY:	-136.4567	XXZ:	-6.5710		
XZZ:	148.7399	YZZ:	-200.5198	YYZ:	76.6808	XYZ:	-13.8188

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-3177.4955	YYYY:	-10953.4006	ZZZZ:	-428.5724
XXXZ:	89.1606	XXXZ:	-45.2760	YYYX:	-267.2905
YYYZ:	-82.2909	ZZZX:	-0.9684	ZZZY:	-889.6940
XXYY:	-1823.6561	XXZZ:	-595.0456	YYZZ:	-2164.0690
XXYZ:	-159.2847	YYXZ:	22.8871	ZZXY:	125.5613

HyperChem log stop -- Tue Jun 25 10:10:37 2013.

**(2) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus alkoksi**

## 2.1 5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon

HyperChem log start -- Mon Jun 24 15:23:52 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000000 Iteration limit = 1234

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

## ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-619215.1032976 (kcal/mol)
Total Energy	=	-986.781956930 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	619624.5975347 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	987.434527455 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1629695.6128495 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1010480.5095519 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0784392 (kcal/mol/Ang)
Net Charge (Electrons):		-0.0000

## Dipole Moment (Debye):

X:	-1.5020	Y:	1.6136	Z:	2.0331	Ttl:	2.9989
----	---------	----	--------	----	--------	------	--------

## Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-118.0674	YY:	-103.1901	ZZ:	-122.8724
XY:	10.2521	XZ:	2.9112	YZ:	4.1268

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	378.1419	YYY:	-174.0488	ZZZ:	-5.9163		
XYY:	41.1799	XXY:	-94.9796	XXZ:	12.2342		
XZZ:	118.3690	YZZ:	-78.6566	YYZ:	6.8172	XYZ:	-26.5422

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-3274.4931	YYYY:	-5418.2868	ZZZZ:	-393.7012
XXXY:	-69.0225	XXXZ:	20.9523	YYYY:	83.4378
YYYZ:	-358.5563	ZZZX:	-3.6055	ZZZY:	-487.5182
XXYY:	-1238.8689	XXZZ:	-582.6783	YYZZ:	-1151.7075
XXYZ:	-43.0279	YYXZ:	-27.7307	ZZXY:	-71.0139

HyperChem log stop -- Tue Jun 25 11:20:37 2013.

## 2.2 5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon

HyperChem log start -- Mon Jul 08 10:23:36 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-619212.7954033 (kcal/mol)
Total Energy	=	-986.778279067 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	619627.7589362 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	987.439565468 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1627745.3186587 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1008532.5232554 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0864898 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-2.9296	Y:	2.8654	Z:	-0.8786	Ttl:	4.1910
----	---------	----	--------	----	---------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-114.0958	YY:	-97.0971	ZZ:	-125.9097
XY:	10.6310	XZ:	11.6558	YZ:	3.0679

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	498.2125	YYY:	-137.9353	ZZZ:	-55.4510		
XYY:	103.6109	XXY:	-73.9443	XXZ:	-59.5630		
XZZ:	193.8989	YZZ:	-78.3781	YYZ:	14.4762	XYZ:	-5.2436

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-4038.7201	YYYY:	-5252.8623	ZZZZ:	-356.8363
XXXZ:	243.2284	YYYX:	148.9462		
YYYZ:	-302.8546	ZZZX:	26.7634	ZZZY:	-544.4237
XXYY:	-1358.0832	XXZZ:	-803.3143	YYZZ:	-1153.7292
XXYZ:	-124.9059	YYXZ:	16.7623	ZZXY:	-15.2655

HyperChem log stop -- Tue Jul 09 09:58:40 2013.

## 2.3 5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon

HyperChem log start -- Thu Jul 04 12:03:37 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-643703.6926678 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1025.807003336 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	644157.1210920 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1026.529587435 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1738060.5081368 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1094356.8154689 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0961967 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-1.4006	Y:	1.7324	Z:	2.1024	Ttl:	3.0632
----	---------	----	--------	----	--------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-124.4316	YY:	-109.9297	ZZ:	-129.3104
XY:	10.4414	XZ:	2.6145	YZ:	3.6010

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	342.1479	YYY:	-199.3426	ZZZ:	-6.0966		
XYY:	26.7797	XXY:	-109.0682	XXZ:	10.0155		
XZZ:	105.5076	YZZ:	-83.9794	YYZ:	7.5633	XYZ:	-28.4903

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-4016.5788	YYYY:	-5562.8308	ZZZZ:	-452.9244
XXXZ:	-12.1437	YYYY:	-97.7756		
YYYZ:	-404.0313	ZZZX:	-42.7426	ZZZY:	-522.2589
XXYY:	-1373.4167	XXZZ:	-708.8125	YYZZ:	-1176.0400
XXYZ:	-50.1015	YYXZ:	-42.8044	ZZXY:	-138.5899

HyperChem log stop -- Fri Jul 05 08:16:48 2013.



## 2.4 5,7-dihidroksi-8-etoksi flavon

HyperChem log start -- Thu Jul 04 11:47:29 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-643699.5007345 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1025.800323066 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	644155.8837103 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1026.527615542 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1741163.4138420 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1097463.9131075 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0788169 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-2.2939	Y:	3.6530	Z:	-0.5609	Ttl:	4.3498
----	---------	----	--------	----	---------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-121.2221	YY:	-103.9254	ZZ:	-134.8897
XY:	8.6978	XZ:	11.4107	YZ:	0.9299

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	641.1744	YYY:	-162.9974	ZZZ:	-59.3147		
XYY:	148.0982	XXY:	-82.7346	XXZ:	-54.3594		
XZZ:	242.1325	YZZ:	-91.8547	YYZ:	21.2441	XYZ:	1.5550

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-5738.2369	YYYY:	-5293.2886	ZZZZ:	-433.8419
XXXZ:	215.2975	YYYX:	78.3684		
YYYZ:	-302.9779	ZZZX:	36.5048	ZZZY:	-511.1354
XXYY:	-1576.3850	XXZZ:	-1118.8457	YYZZ:	-1168.8671
XXYZ:	-139.7076	YYXZ:	-6.4218	ZZXY:	-41.0727

HyperChem log stop -- Fri Jul 05 08:07:35 2013.

## 2.5 5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon

HyperChem log start -- Fri Jul 05 08:04:23 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.000000 Iteration limit = 1234

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-668188.2321961 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1064.825595908 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	668680.8123492 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1065.610572251 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1841006.5727546 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1172818.3405585 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0960967 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-1.0290	Y:	1.7104	Z:	2.2562	Ttl:	3.0124
----	---------	----	--------	----	--------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-128.9917	YY:	-117.8104	ZZ:	-137.6572
XY:	11.3918	XZ:	2.3246	YZ:	2.3180

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	244.5698	YYY:	-203.2423	ZZZ:	5.6915		
XYY:	-0.4128	XXY:	-121.3004	XXZ:	4.5695		
XZZ:	67.4510	YZZ:	-80.8211	YYZ:	18.7473	XYZ:	-28.9184

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-5107.0402	YYYY:	-5537.5803	ZZZZ:	-576.9207
XXXY:	-417.2423	XXXZ:	-29.0351	YYYY:	-341.8765
YYYZ:	-449.0753	ZZZX:	-73.6433	ZZZY:	-547.9088
XXYY:	-1528.5990	XXZZ:	-938.6038	YYZZ:	-1175.8965
XXYZ:	-72.2448	YYXZ:	-67.5429	ZZXY:	-245.7458

HyperChem log stop -- Sat Jul 06 11:46:40 2013.

## 2.6 5,7-dihidroksi-8-propoksi flavon

HyperChem log start -- Fri Jul 05 11:39:37 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-668184.6526744 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1064.819891578 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	668683.9815699 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1065.615622725 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1849334.8649783 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1181150.2123039 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0910406 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-1.9281	Y:	3.7285	Z:	-1.0293	Ttl:	4.3219
----	---------	----	--------	----	---------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-137.1446	YY:	-111.0706	ZZ:	-134.1178
XY:	9.2239	XZ:	6.1503	YZ:	8.0879

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	678.4537	YYY:	-243.7253	ZZZ:	-80.7238		
XYY:	159.0440	XXY:	-106.9833	XXZ:	-57.8552		
XZZ:	210.8291	YZZ:	-109.2985	YYZ:	13.2832	XYZ:	-17.7749

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-5921.9236	YYYY:	-5412.8785	ZZZZ:	-1655.6992
XXXZ:	248.5799	XXXZ:	-487.4771	YYYX:	457.7680
YYYZ:	-386.7848	ZZZX:	-648.3184	ZZZY:	-779.1888
XXYY:	-1658.7105	XXZZ:	-1187.7479	YYZZ:	-1277.2988
XXYZ:	-171.7708	YYXZ:	-236.2668	ZZXY:	48.7398

HyperChem log stop -- Sat Jul 06 11:29:30 2013.

## 2.7 5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon

HyperChem log start -- Fri Jul 05 12:35:36 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-668191.0551706 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1064.830094604 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	668685.6133541 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1065.618223139 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1861531.4867972 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1193340.4316266 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0913235 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-1.1488	Y:	1.4751	Z:	2.1816	Ttl:	2.8732
----	---------	----	--------	----	--------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-130.2218	YY:	-118.2187	ZZ:	-136.5296
XY:	10.4936	XZ:	3.1051	YZ:	3.5839

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	304.3844	YYY:	-200.6365	ZZZ:	14.4863		
XYY:	16.8952	XXY:	-115.2838	XXZ:	12.5333		
XZZ:	87.7486	YZZ:	-81.7756	YYZ:	15.6623	XYZ:	-34.7485

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-4344.9930	YYYY:	-5444.0317	ZZZZ:	-793.6841
XXXZ:	-305.0765	XXXZ:	-116.5270	YYYY:	-168.2598
YYYZ:	-532.7863	ZZZX:	-163.6434	ZZZY:	-688.7101
XXYY:	-1404.9005	XXZZ:	-809.6684	YYZZ:	-1188.1423
XXYZ:	-85.4463	YYXZ:	-55.0055	ZZXY:	-165.9009

HyperChem log stop -- Sat Jul 06 11:38:28 2013.

## 2.8 5,7-dihidroksi-8-isopropoksi flavon

HyperChem log start -- Sat Jul 06 14:41:39 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-668188.5544869 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1064.826109511 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	668687.6569558 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1065.621479825 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1861029.7263570 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1192841.1718701 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0793843 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-2.2538	Y:	3.7865	Z:	-0.8432	Ttl:	4.4865
----	---------	----	--------	----	---------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-133.8576	YY:	-112.7491	ZZ:	-136.1225
XY:	8.4127	XZ:	7.0976	YZ:	6.6269

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	756.3037	YYY:	-119.5225	ZZZ:	-78.9068		
XYY:	176.9101	XXY:	-53.9880	XXZ:	-57.2898		
XZZ:	250.1325	YZZ:	-63.7124	YYZ:	3.5547	XYZ:	-20.7807

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-6754.8096	YYYY:	-5198.0255	ZZZZ:	-888.6062
XXXZ:	32.2196	XXXZ:	-109.8539	YYYX:	331.9941
YYYZ:	-453.4571	ZZZX:	-274.5006	ZZZY:	-777.1862
XXYY:	-1742.5486	XXZZ:	-1240.4888	YYZZ:	-1142.7487
XXYZ:	-157.5706	YYXZ:	-87.2798	ZZXY:	-7.2064

HyperChem log stop -- Sun Jul 07 13:42:07 2013.

## 2.9 5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon

HyperChem log start -- Sat Jul 06 16:09:31 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergenc e= YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 450

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-692674.6513453 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1103.847183847 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	693205.1158033 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1104.692532665 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9992
eK, ee and eN Energy	=	-1991483.9760765 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1298809.3247311 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0915325 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X: 1.2714 Y: -1.8021 Z: -2.0738 Ttl: 3.0273

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -120.4951 YY: -149.2549 ZZ: -143.4015  
 XY: 1.5516 XZ: 3.5435 YZ: -4.7321

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX: 147.1975 YYY: -360.2795 ZZZ: -47.4745  
 XYY: 175.4335 XXY: -119.7638 XXZ: -21.3559  
 XZZ: 109.7539 YZZ: -117.0933 YYZ: -48.3619 XYZ: 13.2489

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -5693.1351 YYYY: -4288.1738 ZZZZ: -593.7597  
 XXXY: 313.1823 XXXZ: 70.1699 YYYY: 544.9550  
 YYYY: -288.7913 ZZZX: -105.8188 ZZZY: -262.3442  
 XYYZ: -2100.6915 XXZZ: -1361.1104 YYZZ: -814.1789  
 XXYZ: -167.9153 YYXZ: -43.1655 ZZXY: 140.6547

HyperChem log stop -- Sun Jul 07 11:16:46 2013.

## 2.10 5,7-dihidroksi-8-t-butoksi flavon

HyperChem log start -- Sun Jul 07 11:13:54 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.000000 Iteration limit = 1234

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 495

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-692660.5058751 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1103.824641608 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	693190.2592384 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1104.668857225 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9992
eK, ee and eN Energy	=	-1994843.1023396 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1302182.5964644 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0808698 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-2.0962	Y:	4.7958	Z:	-0.0157	Ttl:	5.2339
----	---------	----	--------	----	---------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-139.3137	YY:	-121.0591	ZZ:	-145.5064
XY:	5.1751	XZ:	0.1601	YZ:	-0.0704

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	898.2540	YYY:	-90.9541	ZZZ:	7.0415		
XYY:	216.0213	XXY:	-25.3115	XXZ:	1.7760		
XZZ:	302.3933	YZZ:	-67.3208	YYZ:	1.9608	XYZ:	-0.0749

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-8289.0469	YYYY:	-5516.5658	ZZZZ:	-329.6748
XXXZ:	-127.7669	XXXZ:	-12.3962	YYYX:	329.4784
YYYZ:	0.1202	ZZZX:	-14.8159	ZZZY:	1.7260
XXYY:	-2019.9106	XXZZ:	-1423.9905	YYZZ:	-1221.9911
XXYZ:	0.2669	YYXZ:	-2.6408	ZZXY:	3.3906

HyperChem log stop -- Mon Jul 08 11:54:13 2013.

**(3) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugus OH dan NH<sub>2</sub>**

## 3.1 5,7,8-trihidroksi flavon

HyperChem log start -- Fri Jul 26 09:34:33 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -594736.6995831 (kcal/mol)

Total Energy = -947.773142398 (a.u.)

Electronic Kinetic Energy = 595120.4533804 (kcal/mol)

Electronic Kinetic Energy = 948.384692926 (a.u.)

The Virial (-V/T) = 1.9994

eK, ee and eN Energy = -1513769.1278122 (kcal/mol)

Nuclear Repulsion Energy = 919032.4282291 (kcal/mol)

RMS Gradient = 0.0729667 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X: -0.8547 Y: 4.2958 Z: 0.6190 Ttl: 4.4235

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -126.9886 YY: -86.4565 ZZ: -118.9108

XY: 4.0823 XZ: 0.6063 YZ: 4.5893

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX: 574.4095 YYY: -109.6076 ZZZ: -38.2510

XYY: 72.1276 XXY: -37.2789 XXZ: -7.4252

XZZ: 170.8486 YZZ: -75.7766 YYZ: 5.9182 XYZ: -14.1659

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -3996.7903 YYYY: -5173.6936 ZZZZ: -249.8025

XXXZ: -149.2575 XXXZ: -1.4346 YYYY: 213.4006

YYYZ: -234.5347 ZZZX: 20.5011 ZZZY: -470.0817

XXYY: -1185.9379 XXZZ: -622.5768 YYZZ: -1158.2184

XXYZ: -79.8098 YYXZ: 27.1251 ZZXY: 11.9158

HyperChem log stop -- Sat Jul 27 07:22:00 2013.



## 3.2 3-amina-5,7-dihidroksi flavon

HyperChem log start -- Thu Jul 25 11:28:10 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 465

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-582309.0291686 (kcal/mol)
Total Energy	=	-927.968391406 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	582721.5740264 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	928.625823403 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1502054.1202041 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	919745.0910354 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0803626 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-1.0978	Y:	2.5248	Z:	-0.1810	Ttl:	2.7590
----	---------	----	--------	----	---------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-114.8026	YY:	-93.2135	ZZ:	-118.5704
XY:	9.7558	XZ:	3.7053	YZ:	0.7213

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	435.6031	YYY:	-171.1763	ZZZ:	-45.7413		
XYY:	56.2587	XXY:	-81.4120	XXZ:	-30.1263		
XZZ:	148.9533	YZZ:	-75.0647	YYZ:	6.0848	XYZ:	2.1981

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-3054.4567	YYYY:	-5458.0308	ZZZZ:	-341.7829
XXXZ:	115.5452	YYYX:	192.2286		
YYYZ:	-266.6009	ZZZX:	88.9567	ZZZY:	-438.7854
XXYY:	-1183.2051	XXZZ:	-566.9604	YYZZ:	-1141.1613
XXYZ:	-152.0855	YYXZ:	78.1079	ZZXY:	17.4715

HyperChem log stop -- Fri Jul 26 09:39:14 2013.

### 3.3 8-amina-5,7-dihidroksi flavon

HyperChem log start -- Fri Jul 26 09:33:55 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-582308.4954387 (kcal/mol)
Total Energy	=	-927.967540853 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	582721.7488108 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	928.626101940 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9993
eK, ee and eN Energy	=	-1500826.8381116 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	918518.3426729 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0910077 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X: -3.7554 Y: 3.6615 Z: 0.5600 Ttl: 5.2748

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -105.3472 YY: -91.3235 ZZ: -120.9279  
XY: 8.9290 XZ: 1.2184 YZ: 4.3892

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX: 429.9428 YYY: -110.3492 ZZZ: -37.5082  
XYY: 80.5886 XXY: -65.1633 XXZ: -9.7099  
XZZ: 178.0078 YZZ: -75.4822 YYZ: 3.5759 XYZ: -14.4619

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -3161.0681 YYYY: -5269.4657 ZZZZ: -253.5544  
XXXZ: 10.7487 XXXZ: 7.4903 YYYYX: 203.3467  
YYYZ: -246.0006 ZZZX: 18.0834 ZZZY: -470.7403  
XXYY: -1222.9648 XXZZ: -659.4696 YYZZ: -1163.4961  
XXYZ: -75.5303 YYXZ: 39.9886 ZZXY: 12.5156

HyperChem log stop -- Sat Jul 27 07:54:02 2013.

**(4) Modifikasi senyawa khrisin dengan gugua fluor dan klor**

## 4.1 5,7-dihidroksi-3-fluoro flavon

HyperChem log start -- Tue Jul 23 21:36:25 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

## ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -609796.4597424 (kcal/mol)

Total Energy = -971.772394874 (a.u.)

Electronic Kinetic Energy = 610166.9212683 (kcal/mol)

Electronic Kinetic Energy = 972.362762821 (a.u.)

The Virial (-V/T) = 1.9994

eK, ee and eN Energy = -1529370.7907721 (kcal/mol)

Nuclear Repulsion Energy = 919574.3310298 (kcal/mol)

RMS Gradient = 0.0766744 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X: -4.2405 Y: 1.7872 Z: 0.3772 Ttl: 4.6172

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX: -114.8736 YY: -88.9102 ZZ: -117.3055

XY: 6.7336 XZ: 1.0455 YZ: 3.9285

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX: 396.5721 YYY: -136.8413 ZZZ: -40.0880

XYY: 48.5489 XXY: -81.5378 XXZ: -12.1061

XZZ: 144.9216 YZZ: -81.1658 YYZ: 5.3596 XYZ: -13.7202

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX: -2989.4961 YYYY: -5250.4812 ZZZZ: -250.6663

XXXY: -17.2659 XXXZ: 26.8427 YYYYX: 196.1453

YYYZ: -247.7958 ZZZX: 31.8088 ZZZY: -474.2090

XXYY: -1134.5668 XXZZ: -539.5925 YYZZ: -1161.3897

XXYZ: -85.2013 YYXZ: 24.9722 ZZXY: 6.6208

HyperChem log stop -- Wed Jul 24 08:23:40 2013.

## 4.2 5,7-dihidroksi-8-fluoro flavon

HyperChem log start -- Wed Jul 24 10:33:26 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule.

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-835736.5709429 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1331.830836427 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	836159.4261248 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1332.504698970 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9995
eK, ee and eN Energy	=	-1828934.1836057 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	993197.6126628 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0846415 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-0.7001	Y:	2.2787	Z:	0.3269	Ttl:	2.4062
----	---------	----	--------	----	--------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-132.2216	YY:	-92.5084	ZZ:	-125.7684
XY:	11.3832	XZ:	1.7232	YZ:	4.3787

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	660.0307	YYY:	-124.5877	ZZZ:	-25.1404		
XYY:	105.2325	XXY:	-71.5607	XXZ:	-7.5071		
XZZ:	207.9186	YZZ:	-78.1423	YYZ:	7.7919	XYZ:	-15.0150

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-4863.3792	YYYY:	-5169.7107	ZZZZ:	-250.6739
XXXZ:	7.4382	XXXZ:	9.3746	YYYX:	236.5564
YYYZ:	-227.1754	ZZZX:	13.3877	ZZZY:	-451.8330
XXYY:	-1351.3860	XXZZ:	-806.9273	YYZZ:	-1158.9897
XXYZ:	-73.1140	YYXZ:	26.2720	ZZXY:	19.2443

HyperChem log stop -- Wed Jul 24 21:43:05 2013.

## 4.3 5,7-dihidroksi-3-kloro flavon

HyperChem log start -- Wed Jul 24 10:32:43 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-835733.5206176 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1331.825975425 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	836158.7962416 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1332.503695187 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9995
eK, ee and eN Energy	=	-1829074.4138137 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	993340.8931961 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0882865 (kcal/mol/Ang)
Net Charge (Electrons):		-0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-3.9931	Y:	1.9242	Z:	1.4089	Ttl:	4.6510
----	---------	----	--------	----	--------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-123.3501	YY:	-96.7427	ZZ:	-124.0771
XY:	5.0580	XZ:	7.2194	YZ:	3.3025

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	377.0818	YYY:	-181.8735	ZZZ:	-3.4520		
XYY:	25.4066	XXY:	-95.8599	XXZ:	-12.5035		
XZZ:	134.5754	YZZ:	-75.9886	YYZ:	34.3319	XYZ:	7.3750

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-3157.8263	YYYY:	-5393.4817	ZZZZ:	-422.9666
XXXY:	-75.1648	XXXZ:	195.4935	YYYY:	37.8365
YYYZ:	-210.8675	ZZZX:	149.6367	ZZZY:	-390.9629
XXYY:	-1187.5335	XXZZ:	-600.4862	YYZZ:	-1146.6806
XXYZ:	-134.9079	YYXZ:	91.3524	ZZXY:	-23.9069

HyperChem log stop -- Wed Jul 24 21:53:10 2013.

## 4.4 5,7-dihidroksi-8-kloro flavon

HyperChem log start -- Wed Jul 24 10:28:29 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 435

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-825955.4419190 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1316.243617078 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	815824.4014033 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1300.098778342 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	2.0124
eK, ee and eN Energy	=	-1813706.6372160 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	987751.1952971 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0539968 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):

0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	1.2731	Y:	1.2031	Z:	0.1469	Ttl:	1.7578
----	--------	----	--------	----	--------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-128.0162	YY:	-94.6365	ZZ:	-110.8389
XY:	8.3503	XZ:	1.3696	YZ:	2.0823

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	655.2518	YYY:	-150.6546	ZZZ:	-22.2520		
XYY:	121.6918	XXY:	-69.8830	XXZ:	-8.0607		
XZZ:	186.0364	YZZ:	-69.3569	YYZ:	1.2976	XYZ:	-9.4027

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-4699.0499	YYYY:	-5260.8328	ZZZZ:	-194.3732
XXXZ:	-11.6290	XXXZ:	8.4495	YYYY:	166.5578
YYYZ:	-293.5850	ZZZX:	8.0866	ZZZY:	-404.6345
XXYY:	-1408.7462	XXZZ:	-716.7829	YYZZ:	-1036.9276
XXYZ:	-93.8154	YYXZ:	21.6986	ZZXY:	7.9599

HyperChem log stop -- Wed Jul 24 21:33:18 2013.

**(5) Senyawa hesperitin**

HyperChem log start -- Fri Jul 12 12:42:18 2013.

Geometry optimization, AbInitio, molecule

AbInitio

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0000100 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 510

The initial guess of the MO coefficients is from eigenvectors of the core Hamiltonian.

HyperGauss is running DIRECT SCF calculation.

Shell Types: S, S=P.

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy	=	-666174.6314643 (kcal/mol)
Total Energy	=	-1061.616719284 (a.u.)
Electronic Kinetic Energy	=	666584.9713453 (kcal/mol)
Electronic Kinetic Energy	=	1062.270637427 (a.u.)
The Virial (-V/T)	=	1.9994
eK, ee and eN Energy	=	-1721776.4235451 (kcal/mol)
Nuclear Repulsion Energy	=	1055601.7920808 (kcal/mol)
RMS Gradient	=	0.0855509 (kcal/mol/Ang)

Net Charge (Electrons):  
0.0000

Dipole Moment (Debye):

X:	-5.3976	Y:	4.7862	Z:	-0.4557	Ttl:	7.2284
----	---------	----	--------	----	---------	------	--------

Quadrupole Moment (Debye-Ang):

XX:	-79.0709	YY:	-77.7763	ZZ:	-128.2445
XY:	-35.4696	XZ:	6.9227	YZ:	-15.0564

Octapole Moment (Debye-Ang<sup>2</sup>):

XXX:	1668.0126	YYY:	-400.3707	ZZZ:	125.1433		
XYY:	223.3417	XXY:	-45.0332	XXZ:	-16.1773		
XZZ:	668.5113	YZZ:	-276.9928	YYZ:	-36.5853	XYZ:	115.6108

Hexadecapole Moment (Debye-Ang<sup>3</sup>):

XXXX:	-20926.3876	YYYY:	-8936.3040	ZZZZ:	-673.0922
XXXY:	2461.7904	XXXZ:	35.4618	YYYY:	811.2778
YYYZ:	230.2961	ZZZX:	-405.9399	ZZZY:	1136.4789
XXYY:	-2584.8444	XXZZ:	-3919.0030	YYZZ:	-2230.1127
XXYZ:	-486.5911	YYXZ:	393.0615	ZZXY:	1300.2207

HyperChem log stop -- Sat Jul 13 11:10:01 2013.

## Lampiran 4

### Analisis korelasi antar variabel

Correlations

		aktivitas	Et	Eb	Ee	Hf	momen_dipol	E_homo	E_lumo	Log_P	R	a
aktivitas	Pearson Correlation	1	.303	.426	.315	-.303	-.758	.329	-.385	.216	-.426	-.430
	Sig. (2-tailed)		.395	.220	.375	.395	.007	.353	.271	.548	.220	.215
	N	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10

\*\* . Correlation is significant at the 0.01 level (2-tailed).

\* . Correlation is significant at the 0.05 level (2-tailed).



## Lampiran 5

### Analisis regresi multilinier

#### 1. Parameter : energi total

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.359 <sup>a</sup>	.129	.020	.75285

a. Predictors: (Constant), Et

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.671	1	.671	1.185	.308 <sup>a</sup>
	Residual	4.534	8	.567		
	Total	5.206	9			

a. Predictors: (Constant), Et

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-5.532	3.249		-1.703	.127
	Et	-3.962E-5	.000	-.359	-1.088	.308

a. Dependent Variable: aktivitas

#### 2. Parameter : energi ikat

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.480 <sup>a</sup>	.230	.134	.70764

a. Predictors: (Constant), Eb

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	1.200	1	1.200	2.396	.160 <sup>a</sup>
	Residual	4.006	8	.501		
	Total	5.206	9			

a. Predictors: (Constant), Eb

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	3.458	3.537		.978	.357
	Eb	.002	.001	.480	1.548	.160

a. Dependent Variable: aktivitas

### 3. Parameter : energi elektronik

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.361 <sup>a</sup>	.130	.021	.63894

a. Predictors: (Constant), Ee

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.489	1	.489	1.198	.306 <sup>a</sup>
	Residual	3.266	8	.408		
	Total	3.755	9			

a. Predictors: (Constant), Ee

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	.038	2.133		.018	.986
	Ee	4.220E-6	.000	.361	1.094	.306

a. Dependent Variable: aktivitas

**4. Parameter : panas pembentukan****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.006 <sup>a</sup>	.000	-.125	.80665

a. Predictors: (Constant), Hf

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.000	1	.000	.000	.987 <sup>a</sup>
	Residual	5.206	8	.651		
	Total	5.206	9			

a. Predictors: (Constant), Hf

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-2.098	5.456		-.385	.711
	Hf	8.551E-5	.005	.006	.017	.987

a. Dependent Variable: aktivitas

## 5. Parameter : momen dipol

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.621 <sup>a</sup>	.385	.308	.52956

a. Predictors: (Constant), momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	1.406	1	1.406	5.015	.055 <sup>a</sup>
	Residual	2.243	8	.280		
	Total	3.650	9			

a. Predictors: (Constant), momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-.553	.705		-.785	.455
	momen_dipol	-.488	.218	-.621	-2.239	.055

a. Dependent Variable: aktivitas

## 6. Parameter : energi HOMO

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.611 <sup>a</sup>	.374	.295	.48421

a. Predictors: (Constant), E\_homo

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	1.119	1	1.119	4.773	.060 <sup>a</sup>
	Residual	1.876	8	.234		
	Total	2.995	9			

a. Predictors: (Constant), E\_homo

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	19.643	10.016		1.961	.086
	E_homo	2.432	1.113	.611	2.185	.060

a. Dependent Variable: aktivitas

## 7. Parameter : energi LUMO

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.127 <sup>a</sup>	.016	-.107	.80012

a. Predictors: (Constant), E\_lumo

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.084	1	.084	.132	.726 <sup>a</sup>
	Residual	5.122	8	.640		
	Total	5.206	9			

a. Predictors: (Constant), E\_lumo

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-3.355	3.730		-0.899	.395
	E_lumo	-1.676	4.622	-.127	-.363	.726

a. Dependent Variable: aktivitas

## 8. Parameter : log P

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.453 <sup>a</sup>	.205	.106	.69469

a. Predictors: (Constant), Log\_P

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.996	1	.996	2.064	.189 <sup>a</sup>
	Residual	3.861	8	.483		
	Total	4.857	9			

a. Predictors: (Constant), Log\_P

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-3.248	.763		-4.258	.003
	Log_P	-.398	.277	-.453	-1.437	.189

a. Dependent Variable: aktivitas

## 9. parameter : refraktivitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.247 <sup>a</sup>	.061	-.057	.78175

a. Predictors: (Constant), R

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.317	1	.317	.518	.492 <sup>a</sup>
	Residual	4.889	8	.611		
	Total	5.206	9			

a. Predictors: (Constant), R

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	2.160	5.792		.373	.719
	R	-.050	.070	-.247	-.720	.492

a. Dependent Variable: aktivitas

## 10. Parameter : polarisabilitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.246 <sup>a</sup>	.060	-.057	.78191

a. Predictors: (Constant), a

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.315	1	.315	.515	.494 <sup>a</sup>
	Residual	4.891	8	.611		
	Total	5.206	9			

a. Predictors: (Constant), a

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	1.667	5.126		.325	.753
	a	-.129	.180	-.246	-.717	.494

a. Dependent Variable: aktivitas

## 11. Parameter : momen dipol, energi total

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.685 <sup>a</sup>	.470	.318	.62809

a. Predictors: (Constant), Et, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.447	2	1.224	3.101	.109 <sup>a</sup>
	Residual	2.761	7	.394		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Et, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas



**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-6.395	2.740		-2.334	.052
	momen_dipol	-.609	.287	-.648	-2.120	.072
	Et	-7.079E-5	.000	-.642	-2.099	.074

a. Dependent Variable: aktivitas

## 12. Parameter : momen dipol, energi ikat

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.776 <sup>a</sup>	.603	.489	.50158

a. Predictors: (Constant), Eb, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.674	2	1.337	5.313	.039 <sup>a</sup>
	Residual	1.761	7	.252		
	Total	4.435	9			

a. Predictors: (Constant), Eb, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	1.458	2.699		.540	.606
	momen_dipol	-.568	.254	-.656	-2.235	.061
	Eb	.001	.001	.183	.622	.553

a. Dependent Variable: aktivitas

### 13. Parameter : momen dipol, energi elektronik

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.582 <sup>a</sup>	.339	.150	.70124

a. Predictors: (Constant), Ee, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	1.766	2	.883	1.796	.235 <sup>a</sup>
	Residual	3.442	7	.492		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Ee, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-4.079	2.350		-1.736	.126
	momen_dipol	-.570	.326	-.607	-1.747	.124
	Ee	-7.020E-6	.000	-.510	-1.466	.186

a. Dependent Variable: aktivitas

### 14. Parameter : momen dipol, panas pembentukan

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.424 <sup>a</sup>	.180	-.054	.78103

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.938	2	.469	.769	.499 <sup>a</sup>
	Residual	4.270	7	.610		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-4.269	5.563		-.767	.468
	momen_dipol	-.455	.367	-.484	-1.240	.255
	Hf	.003	.006	.239	.613	.559

a. Dependent Variable: aktivitas

## 15. Parameter : momen dipol, energi HOMO

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.759 <sup>a</sup>	.576	.455	.56163

a. Predictors: (Constant), E\_homo, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.000	2	1.500	4.756	.050 <sup>a</sup>
	Residual	2.208	7	.315		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_homo, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	30.932	11.840		2.612	.035
	momen_dipol	-.184	.239	-.196	-.769	.467
	E_homo	3.597	1.335	.686	2.695	.031

a. Dependent Variable: aktivitas

**16. Parameter : momen dipol, energi LUMO****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.371 <sup>a</sup>	.138	-.109	.80102

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.717	2	.358	.559	.595 <sup>a</sup>
	Residual	4.491	7	.642		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-.399	4.778		-.083	.936
	momen_dipol	-.364	.367	-.388	-.993	.354
	E_lumo	.574	5.153	.044	.111	.914

a. Dependent Variable: aktivitas

### 17. Parameter : momen dipol, log P

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.576 <sup>a</sup>	.331	.140	.67727

a. Predictors: (Constant), Log\_P, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	1.592	2	.796	1.735	.244 <sup>a</sup>
	Residual	3.211	7	.459		
	Total	4.803	9			

a. Predictors: (Constant), Log\_P, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-2.216	1.017		-2.179	.066
	momen_dipol	-.318	.292	-.353	-1.088	.312
	Log_P	-.500	.283	-.573	-1.769	.120

a. Dependent Variable: aktivitas

### 18. Parameter : momen dipol, refraktivitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.370 <sup>a</sup>	.137	-.109	.80120

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.715	2	.357	.557	.596 <sup>a</sup>
	Residual	4.493	7	.642		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-.283	6.692		-.042	.967
	momen_dipol	-.323	.410	-.344	-.789	.456
	R	-.009	.089	-.042	-.096	.926

a. Dependent Variable: aktivitas

## 19. Parameter : momen dipol, polarisabilitas

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.370 <sup>a</sup>	.137	-.109	.80129

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.714	2	.357	.556	.597 <sup>a</sup>
	Residual	4.494	7	.642		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-.409	5.871		-.070	.946
	momen_dipol	-.325	.411	-.346	-.790	.456
	a	-.020	.231	-.039	-.088	.932

a. Dependent Variable: aktivitas

## 20. Parameter : momen dipol, energi total, energi ikat

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.901 <sup>a</sup>	.812	.718	.40372

a. Predictors: (Constant), Eb, Et, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.231	3	1.410	8.652	.013 <sup>a</sup>
	Residual	.978	6	.163		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Eb, Et, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-1.129	2.374		-.476	.651
	momen_dipol	-.290	.208	-.309	-1.393	.213
	Et	-9.983E-5	.000	-.905	-4.268	.005
	Eb	.004	.001	.777	3.308	.016

a. Dependent Variable: aktivitas

## 21. Parameter : momen dipol, energi total, energi elektronik

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.862 <sup>a</sup>	.743	.614	.47250

a. Predictors: (Constant), Ee, momen\_dipol, Et

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.869	3	1.290	5.776	.033 <sup>a</sup>
	Residual	1.340	6	.223		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Ee, momen\_dipol, Et

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-11.785	2.968		-3.970	.007
	momen_dipol	-.479	.222	-.511	-2.161	.074
	Et	.000	.000	-3.253	-3.069	.022
	Ee	3.753E-5	.000	2.724	2.524	.045

a. Dependent Variable: aktivitas

## 22. Parameter : momen dipol, energi total, panas pembentukan

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.720 <sup>a</sup>	.518	.277	.62134

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol, Et



ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.487	3	.829	2.147	.196 <sup>a</sup>
	Residual	2.316	6	.386		
	Total	4.803	9			

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol, Et

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	3.638	5.129		.709	.505
	momen_dipol	-.206	.292	-.229	-.707	.506
	Et	.000	.000	-1.607	-2.438	.051
	Hf	-.019	.009	-1.353	-2.000	.092

a. Dependent Variable: aktivitas

### 23. Parameter : momen dipol, energi total, energi HOMO

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.796 <sup>a</sup>	.633	.450	.56413

a. Predictors: (Constant), E\_homo, momen\_dipol, Et

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.299	3	1.100	3.455	.092 <sup>a</sup>
	Residual	1.909	6	.318		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_homo, momen\_dipol, Et

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	20.059	16.354		1.227	.266
	momen_dipol	-.358	.300	-.381	-1.194	.278
	Et	-3.589E-5	.000	-.325	-.969	.370
	E_homo	2.683	1.639	.511	1.636	.153

a. Dependent Variable: aktivitas

**24. Parameter : momen dipol, energi total, energi LUMO****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.757 <sup>a</sup>	.573	.359	.60892

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, Et, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.984	3	.995	2.682	.140 <sup>a</sup>
	Residual	2.225	6	.371		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, Et, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-3.132	3.796		-.825	.441
	momen_dipol	-.843	.340	-.897	-2.482	.048
	Et	-8.970E-5	.000	-.813	-2.472	.048
	E_lumo	5.229	4.346	.397	1.203	.274

a. Dependent Variable: aktivitas

## 25. Parameter : momen dipol, energi total, log P

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.660 <sup>a</sup>	.435	.153	.67228

a. Predictors: (Constant), Log\_P, momen\_dipol, Et

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.091	3	.697	1.542	.298 <sup>a</sup>
	Residual	2.712	6	.452		
	Total	4.803	9			

a. Predictors: (Constant), Log\_P, momen\_dipol, Et

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	5.062	7.000		.723	.497
	momen_dipol	-.158	.328	-.175	-.481	.647
	Et	.000	.000	1.054	1.051	.334
	Log_P	-1.317	.826	-1.508	-1.594	.162

a. Dependent Variable: aktivitas

## 26. Parameter : momen dipol, energi total, refraktivitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.902 <sup>a</sup>	.813	.720	.40265

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol, Et

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.236	3	1.412	8.708	.013 <sup>a</sup>
	Residual	.973	6	.162		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol, Et

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	3.506	3.460		1.013	.350
	momen_dipol	-.301	.206	-.321	-1.462	.194
	Et	.000	.000	-1.250	-4.660	.003
	R	-.203	.061	-.997	-3.322	.016

a. Dependent Variable: aktivitas

## 27. Parameter : momen dipol, energi total, polarisabilitas

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.902 <sup>a</sup>	.814	.721	.40170

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol, Et

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.240	3	1.413	8.759	.013 <sup>a</sup>
	Residual	.968	6	.161		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol, Et

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	1.620	2.975		.545	.606
	momen_dipol	-.294	.206	-.314	-1.427	.203
	Et	.000	.000	-1.256	-4.675	.003
	a	-.530	.159	-1.006	-3.334	.016

a. Dependent Variable: aktivitas

**28. Parameter : momen dipol, energi ikat, energi elektronik****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.924 <sup>a</sup>	.854	.805	.31518

a. Predictors: (Constant), momen\_dipol, Ee, Eb

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.752	3	1.584	10.150	.006 <sup>a</sup>
	Residual	1.093	7	.156		
	Total	5.845	10			

a. Predictors: (Constant), momen\_dipol, Ee, Eb

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	2.693	2.097		1.285	.240
	Eb	.004	.001	.932	3.915	.006
	Ee	-1.265E-5	.000	-1.130	-5.079	.001
	momen_dipol	-.250	.202	-.264	-1.240	.255

a. Dependent Variable: aktivitas

### 29. Parameter : momen dipol, energi ikat, panas pembentukan

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.764 <sup>a</sup>	.584	.376	.60101

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol, Eb

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.041	3	1.014	2.806	.131 <sup>a</sup>
	Residual	2.167	6	.361		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol, Eb

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-3.330	4.299		-.775	.468
	momen_dipol	-.173	.305	-.184	-.567	.591
	Eb	.005	.002	1.063	2.413	.052
	Hf	.013	.006	.906	2.220	.068

a. Dependent Variable: aktivitas

### 30. Parameter : momen dipol, energi ikat, energi HOMO

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.773 <sup>a</sup>	.597	.396	.59143

a. Predictors: (Constant), E\_homo, momen\_dipol, Eb

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.110	3	1.037	2.963	.119 <sup>a</sup>
	Residual	2.099	6	.350		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_homo, momen\_dipol, Eb

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	30.689	12.476		2.460	.049
	momen_dipol	-.092	.300	-.098	-.307	.769
	Eb	.001	.002	.186	.559	.596
	E_homo	3.367	1.464	.642	2.299	.061

a. Dependent Variable: aktivitas

### 31. Parameter : momen dipol, energi ikat, energi LUMO

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.576 <sup>a</sup>	.331	-.003	.76194

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, Eb, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	1.725	3	.575	.990	.458 <sup>a</sup>
	Residual	3.483	6	.581		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, Eb, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	.973	4.662		.209	.842
	momen_dipol	.298	.612	.317	.486	.644
	Eb	.004	.003	.803	1.318	.236
	E_lumo	-6.497	7.267	-.493	-.894	.406

a. Dependent Variable: aktivitas

**32. Parameter : momen dipol, energi ikat, log P****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.902 <sup>a</sup>	.814	.721	.40207

a. Predictors: (Constant), Log\_P, Eb, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.238	3	1.413	8.740	.013 <sup>a</sup>
	Residual	.970	6	.162		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Log\_P, Eb, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	2.120	2.172		.976	.367
	momen_dipol	-.330	.209	-.351	-1.576	.166
	Eb	.002	.001	.439	2.020	.090
	Log_P	-.721	.168	-.793	-4.292	.005

a. Dependent Variable: aktivitas



### 33. Parameter : momen dipol, energi ikat, refraktivitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.900 <sup>a</sup>	.809	.714	.40701

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol, Eb

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.214	3	1.405	8.480	.014 <sup>a</sup>
	Residual	.994	6	.166		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol, Eb

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-13.226	4.414		-2.996	.024
	momen_dipol	-.259	.209	-.276	-1.241	.261
	Eb	.013	.003	2.813	4.596	.004
	R	.532	.126	2.608	4.222	.006

a. Dependent Variable: aktivitas

### 34. Parameter : momen dipol, energi ikat, polarisabilitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.898 <sup>a</sup>	.807	.711	.40902

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol, Eb

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.205	3	1.402	8.378	.014 <sup>a</sup>
	Residual	1.004	6	.167		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol, Eb

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-8.146	3.443		-2.366	.056
	momen_dipol	-.276	.210	-.293	-1.310	.238
	Eb	.013	.003	2.781	4.568	.004
	a	1.362	.325	2.587	4.195	.006

a. Dependent Variable: aktivitas

### 35. Parameter : momen dipol, energi elektronik, panas pembentukan

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.883 <sup>a</sup>	.780	.670	.43676

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol, Ee

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.064	3	1.355	7.101	.021 <sup>a</sup>
	Residual	1.145	6	.191		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol, Ee

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	14.969	5.680		2.635	.039
	momen_dipol	-.477	.205	-.507	-2.324	.059
	Ee	-3.709E-5	.000	-2.692	-4.048	.007
	Hf	-.033	.010	-2.328	-3.470	.013

a. Dependent Variable: aktivitas

**36. Parameter : momen dipol, energi elektronik, energi HOMO****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.772 <sup>a</sup>	.596	.393	.59246

a. Predictors: (Constant), E\_homo, momen\_dipol, Ee

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.102	3	1.034	2.946	.121 <sup>a</sup>
	Residual	2.106	6	.351		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_homo, momen\_dipol, Ee

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	25.963	15.526		1.672	.146
	momen_dipol	-.283	.313	-.302	-.906	.400
	Ee	-2.510E-6	.000	-.182	-.539	.609
	E_homo	3.163	1.621	.603	1.951	.099

a. Dependent Variable: aktivitas

### 37. Parameter : momen dipol, energi elektronik, energi LUMO

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.657 <sup>a</sup>	.432	.148	.70214

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, Ee, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.250	3	.750	1.522	.302 <sup>a</sup>
	Residual	2.958	6	.493		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, Ee, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-.643	4.190		-.154	.883
	momen_dipol	-.820	.412	-.873	-1.987	.094
	Ee	-9.759E-6	.000	-.709	-1.764	.128
	E_lumo	5.167	5.214	.392	.991	.360

a. Dependent Variable: aktivitas

### 38. Parameter : momen dipol, energi elektronik, log P

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.897 <sup>a</sup>	.805	.708	.41115

a. Predictors: (Constant), Log\_P, momen\_dipol, Ee

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.194	3	1.398	8.270	.015 <sup>a</sup>
	Residual	1.014	6	.169		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Log\_P, momen\_dipol, Ee

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	1.609	2.037		.790	.460
	momen_dipol	-.405	.196	-.432	-2.066	.084
	Ee	1.019E-5	.000	.739	1.908	.105
	Log_P	-1.237	.326	-1.361	-3.790	.009

a. Dependent Variable: aktivitas

### 39. Parameter : momen dipol, energi elektronik, refraktivitas

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.890 <sup>a</sup>	.792	.688	.42466

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol, Ee

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.126	3	1.375	7.627	.018 <sup>a</sup>
	Residual	1.082	6	.180		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol, Ee

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	10.919	4.383		2.491	.047
	momen_dipol	-.237	.218	-.252	-1.087	.319
	Ee	-2.136E-5	.000	-1.551	-4.349	.005
	R	-.289	.080	-1.417	-3.618	.011

a. Dependent Variable: aktivitas

**40. Parameter : momen dipol, energi elektronik, polarisabilitas****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.890 <sup>a</sup>	.792	.688	.42501

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol, Ee

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	4.125	3	1.375	7.612	.018 <sup>a</sup>
	Residual	1.084	6	.181		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol, Ee

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	8.248	3.697		2.231	.067
	momen_dipol	-.228	.219	-.243	-1.038	.339
	Ee	-2.146E-5	.000	-1.558	-4.345	.005
	a	-.752	.208	-1.429	-3.613	.011

a. Dependent Variable: aktivitas

#### 41. Parameter : momen dipol, panas pembentukan, energi HOMO

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.764 <sup>a</sup>	.583	.375	.60158

a. Predictors: (Constant), E\_homo, Hf, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.037	3	1.012	2.797	.131 <sup>a</sup>
	Residual	2.171	6	.362		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_homo, Hf, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	34.336	16.594		2.069	.084
	momen_dipol	-.126	.314	-.134	-.402	.702
	Hf	-.002	.005	-.106	-.318	.761
	E_homo	3.814	1.584	.727	2.408	.053

a. Dependent Variable: aktivitas

#### 42. Parameter : momen dipol, panas pembentukan, energi LUMO

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.457 <sup>a</sup>	.209	-.187	.82889

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, Hf, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	1.086	3	.362	.527	.680 <sup>a</sup>
	Residual	4.122	6	.687		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, Hf, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-3.256	6.296		-.517	.624
	momen_dipol	-.595	.494	-.634	-1.206	.273
	Hf	.005	.007	.352	.733	.491
	E_lumo	2.866	6.182	.217	.464	.659

a. Dependent Variable: aktivitas

### 43. Parameter : momen dipol, panas pembentukan, log P

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.704 <sup>a</sup>	.495	.243	.63555

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol, Log\_P

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.379	3	.793	1.964	.221 <sup>a</sup>
	Residual	2.424	6	.404		
	Total	4.803	9			

a. Predictors: (Constant), Hf, momen\_dipol, Log\_P

b. Dependent Variable: aktivitas



**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	5.778	5.805		.995	.358
	momen_dipol	-.151	.299	-.167	-.503	.633
	Log_P	-.854	.367	-.978	-2.328	.059
	Hf	-.009	.006	-.638	-1.396	.212

a. Dependent Variable: aktivitas

**44. Parameter : momen dipol, panas pembentukan, refraktivitas****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.619 <sup>a</sup>	.383	.074	.73195

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol, Hf

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	1.994	3	.665	1.241	.375 <sup>a</sup>
	Residual	3.215	6	.536		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol, Hf

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	.237	6.123		.039	.970
	momen_dipol	-.229	.379	-.244	-.605	.567
	Hf	.017	.011	1.170	1.545	.173
	R	-.236	.168	-1.158	-1.404	.210

a. Dependent Variable: aktivitas

#### 45. Parameter : momen dipol, panas pembentukan, polarisabilitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.615 <sup>a</sup>	.378	.067	.73461

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol, Hf

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	1.970	3	.657	1.217	.382 <sup>a</sup>
	Residual	3.238	6	.540		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), a, momen\_dipol, Hf

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-2.003	5.483		-.365	.727
	momen_dipol	-.225	.383	-.239	-.587	.579
	Hf	.017	.011	1.162	1.526	.178
	a	-.606	.438	-1.152	-1.383	.216

a. Dependent Variable: aktivitas

#### 46. Parameter : momen dipol, energi HOMO, energi LUMO

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.791 <sup>a</sup>	.626	.439	.56993

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, E\_homo, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.260	3	1.087	3.345	.097 <sup>a</sup>
	Residual	1.949	6	.325		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), E\_lumo, E\_homo, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	32.025	12.077		2.652	.038
	momen_dipol	-.051	.284	-.055	-.180	.863
	E_homo	4.080	1.458	.778	2.798	.031
	E_lumo	-3.526	3.948	-.267	-.893	.406

a. Dependent Variable: aktivitas

#### 47. Parameter : momen dipol, energi HOMO, log P

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.853 <sup>a</sup>	.728	.592	.48567

a. Predictors: (Constant), Log\_P, momen\_dipol, E\_homo

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.793	3	1.264	5.360	.039 <sup>a</sup>
	Residual	1.415	6	.236		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Log\_P, momen\_dipol, E\_homo

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	11.821	14.612		.809	.449
	momen_dipol	-.438	.249	-.466	-1.760	.129
	E_homo	1.536	1.611	.293	.954	.377
	Log_P	-.519	.283	-.571	-1.833	.116

a. Dependent Variable: aktivitas

**48. Parameter : momen dipol, energi HOMO, refraktivitas****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.760 <sup>a</sup>	.577	.366	.60562

a. Predictors: (Constant), R, E\_homo, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.008	3	1.003	2.734	.136 <sup>a</sup>
	Residual	2.201	6	.367		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), R, E\_homo, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	31.647	13.736		2.304	.061
	momen_dipol	-.158	.317	-.168	-.498	.636
	E_homo	3.598	1.439	.686	2.500	.047
	R	-.010	.067	-.047	-.141	.892

a. Dependent Variable: aktivitas

#### 49. Parameter : momen dipol, energi HOMO, polarisabilitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.760 <sup>a</sup>	.577	.366	.60579

a. Predictors: (Constant), a, E\_homo, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.007	3	1.002	2.731	.136 <sup>a</sup>
	Residual	2.202	6	.367		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), a, E\_homo, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	31.501	13.517		2.330	.059
	momen_dipol	-.160	.318	-.170	-.502	.633
	E_homo	3.598	1.439	.686	2.499	.047
	a	-.022	.174	-.043	-.129	.902

a. Dependent Variable: aktivitas

#### 50. Parameter : momen dipol, energi LUMO, log P

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.854 <sup>a</sup>	.730	.595	.48411

a. Predictors: (Constant), Log\_P, E\_lumo, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	3.802	3	1.267	5.408	.038 <sup>a</sup>
	Residual	1.406	6	.234		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), Log\_P, E\_lumo, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	.648	2.902		.223	.831
	momen_dipol	-.677	.238	-.721	-2.846	.029
	E_lumo	3.118	3.192	.237	.977	.366
	Log_P	-.752	.207	-.827	-3.628	.011

a. Dependent Variable: aktivitas

## 51. Parameter : momen dipol, energi LUMO, refraktivitas

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.371 <sup>a</sup>	.138	-.293	.86518

a. Predictors: (Constant), R, E\_lumo, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.717	3	.239	.319	.812 <sup>a</sup>
	Residual	4.491	6	.749		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), R, E\_lumo, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-.306	7.239		-.042	.968
	momen_dipol	-.354	.710	-.377	-.498	.636
	E_lumo	.461	8.344	.035	.055	.958
	R	-.003	.144	-.013	-.018	.986

a. Dependent Variable: aktivitas

**52. Parameter : momen dipol, energi LUMO, polarisabilitas****Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.371 <sup>a</sup>	.138	-.294	.86520

a. Predictors: (Constant), a, E\_lumo, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.717	3	.239	.319	.812 <sup>a</sup>
	Residual	4.491	6	.749		
	Total	5.208	9			

a. Predictors: (Constant), a, E\_lumo, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-.374	6.364		-.059	.955
	momen_dipol	-.361	.716	-.384	-.503	.633
	E_lumo	.532	8.380	.040	.064	.951
	a	-.002	.375	-.005	-.007	.995

a. Dependent Variable: aktivitas

### 53. Parameter : momen dipol, log P, refraktivitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.671 <sup>a</sup>	.450	.175	.66371

a. Predictors: (Constant), R, Log\_P, momen\_dipol

**ANOVA<sup>b</sup>**

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.160	3	.720	1.634	.278 <sup>a</sup>
	Residual	2.643	6	.441		
	Total	4.803	9			

a. Predictors: (Constant), R, Log\_P, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	4.323	5.845		.740	.487
	momen_dipol	-.111	.340	-.123	-.327	.755
	Log_P	-.636	.302	-.728	-2.107	.080
	R	-.091	.080	-.465	-1.135	.300

a. Dependent Variable: aktivitas

### 54. Parameter : momen dipol, log P, polarisabilitas

**Model Summary**

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.791 <sup>a</sup>	.626	.440	.53097

a. Predictors: (Constant), a, Log\_P, momen\_dipol



ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.836	3	.945	3.353	.097 <sup>a</sup>
	Residual	1.692	6	.282		
	Total	4.528	9			

a. Predictors: (Constant), a, Log\_P, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

Coefficients<sup>a</sup>

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-.384	4.091		-.094	.928
	momen_dipol	-.622	.273	-.711	-2.282	.063
	Log_P	-.494	.242	-.583	-2.042	.087
	a	-.040	.167	-.082	-.243	.816

a. Dependent Variable: aktivitas

## 55. Parameter : momen dipol, refraktivitas, polarisabilitas

Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate
1	.648 <sup>a</sup>	.420	.254	.67935

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol

ANOVA<sup>b</sup>

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	2.340	2	1.170	2.535	.149 <sup>a</sup>
	Residual	3.231	7	.462		
	Total	5.570	9			

a. Predictors: (Constant), R, momen\_dipol

b. Dependent Variable: aktivitas

**Coefficients<sup>a</sup>**

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-3.316	5.674		-.584	.577
	momen_dipol	-.725	.347	-.747	-2.087	.075
	R	.042	.075	.201	.561	.593

a. Dependent Variable: aktivitas

## Lampiran 6

### Perhitungan aktivitas antioksidan

#### A. Menggunakan deskriptor molekuler hasil optimasi RM1

##### 1. Senyawa turunan flavon/flavonol

$$\log(1/IC_{50}) = 2,4686 + (-0,24217)\mu + (0,0046479)E_b + (-0,000013884)E_e \dots(1)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7182	-2,692
2	Galagin	-1,6887	-1,855
3	Apigenin	-2,3671	-2,665
4	Kaemferol	-1,3948	-1,447
5	Luteolin	-1,6873	-1,043
6	Quercetin	-1,3771	-1,037
7	Morin	-0,9674	-1,237
8	Acacetin	-2,988	-2,919
9	Diosmetin	-2,1571	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7122	-2,496

##### 2. 5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 3,5505 + (-0,094469)\mu + (0,0053454)E_b + (-0,00014095)E_e \dots(2)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7385	-2,692
2	Galagin	-1,9106	-1,855
3	Apigenin	-2,2881	-2,665
4	Kaemferol	-1,4665	-1,447
5	Luteolin	-1,6508	-1,043
6	Quercetin	-1,4594	-1,037
7	Morin	-0,8453	-1,237
8	Acacetin	-2,9984	-2,919
9	Diosmetin	-2,2625	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,8613	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon	-2,4955	-2,919

## 3. 5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 3,2214 + (-0,173327)\mu + (0,0051437)E_b + (-0,00001425)E_e \dots(3)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7542	-2,692
2	Galagin	-1,8064	-1,855
3	Apigenin	-2,3483	-2,665
4	Kaemferol	-1,4333	-1,447
5	Luteolin	-1,6777	-1,043
6	Quercetin	-1,4206	-1,037
7	Morin	-0,9026	-1,237
8	Acacetin	-3,0395	-2,919
9	Diosmetin	-2,2410	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,8425	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon	-2,5109	-2,919

## 4. 5,7-dihidroksi-2'-metoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 2,4795 + (-0,25685)\mu + (0,0046615)E_b + (-0,000013998)E_e \dots(4)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7292	-2,692
2	Galagin	-1,6735	-1,855
3	Apigenin	-2,3836	-2,665
4	Kaemferol	-1,3897	-1,447
5	Luteolin	-1,6942	-1,043
6	Quercetin	-1,3710	-1,037
7	Morin	-0,97499	-1,237
8	Acacetin	-3,0094	-2,919
9	Diosmetin	-2,1630	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7261	-2,496
11	5,7-dihidroksi-2'-metoksi flavon	-2,8623	-2,919

## 5. 5,7-dihidroksi-3'-metoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 2,9545 + (-0,19342)\mu + (0,0050204)E_b + (-0,00001433)E_e \dots(5)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7544	-2,692
2	Galagin	-1,7727	-1,855
3	Apigenin	-2,3567	-2,665
4	Kaemferol	-1,4146	-1,447
5	Luteolin	-1,6745	-1,043
6	Quercetin	-1,4004	-1,037
7	Morin	-0,9032	-1,237
8	Acacetin	-3,0248	-2,919

9	Diosmetin	-2,2071	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7905	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3'-metoksi flavon	-2,8623	-2,919

## 6. 5,7-dihidroksi-5'-metoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 2,4623 + (-0,24117)\mu + (0,004641)E_b + (-0,00001386)E_e \dots(6)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7162	-2,692
2	Galagin	-1,6893	-1,855
3	Apigenin	-2,3653	-2,665
4	Kaemferol	-1,3952	-1,447
5	Luteolin	-1,6869	-1,043
6	Quercetin	-1,3776	-1,037
7	Morin	-0,9678	-1,237
8	Acacetin	-2,9852	-2,919
9	Diosmetin	-2,1561	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,710	-2,496
11	5,7-dihidroksi-5'-metoksi flavon	-2,9274	-2,919

## 7. 5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 2,5802 + (-0,23108)\mu + (0,0047105)E_b + (-0,000013893)E_e \dots(7)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7165	-2,692
2	Galagin	-1,7027	-1,855
3	Apigenin	-2,3585	-2,665
4	Kaemferol	-1,3980	-1,447
5	Luteolin	-1,6824	-1,043
6	Quercetin	-1,3811	-1,037
7	Morin	-0,9566	-1,237
8	Acacetin	-2,9888	-2,919
9	Diosmetin	-2,1655	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7266	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon	-2,6735	-2,919

## 8. 5,7-dihidroksi-8-etoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 3,1035 + (-0,15534)\mu + (0,005013)E_b + (-0,000013844)E_e \dots(8)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7028	-2,692
2	Galagin	-1,8002	-1,855
3	Apigenin	-2,2997	-2,665

4	Kaemferol	-1,4246	-1,447
5	Luteolin	-1,6522	-1,043
6	Quercetin	-1,4131	-1,037
7	Morin	-0,8922	-1,237
8	Acacetin	-2,9694	-2,919
9	Diosmetin	-2,2025	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7812	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-etoksi flavon	-2,6121	-2,919

9. 5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 1,6742 + (-0,3101)\mu + (0,0042181)E_b + (-0,000013823)E_e \dots(9)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7359	-2,692
2	Galagin	-1,6104	-1,855
3	Apigenin	-2,4271	-2,665
4	Kaemferol	-1,3819	-1,447
5	Luteolin	-1,7244	-1,043
6	Quercetin	-1,3594	-1,037
7	Morin	-1,0399	-1,237
8	Acacetin	-2,9803	-2,919
9	Diosmetin	-2,1024	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6105	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon	-2,7777	-2,919

10. 5,7-dihidroksi-8-propoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 2,4643 + (-0,24267)\mu + (0,0046455)E_b + (-0,000013884)E_e \dots(10)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7183	-2,692
2	Galagin	-1,6881	-1,855
3	Apigenin	-2,3675	-2,665
4	Kaemferol	-1,3946	-1,447
5	Luteolin	-1,6876	-1,043
6	Quercetin	-1,3769	-1,037
7	Morin	-0,96785	-1,237
8	Acacetin	-2,9881	-2,919
9	Diosmetin	-2,1568	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7117	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-propoksi flavon	-2,6924	-2,919

11. 5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 2,3885 + (-0,25001)\mu + (0,0046058)E_b + (-0,000013889)E_e \dots(11)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7207	-2,692
2	Galagin	-1,6796	-1,855
3	Apigenin	-2,3741	-2,665
4	Kaemferol	-1,3927	-1,447
5	Luteolin	-1,6912	-1,043
6	Quercetin	-1,3745	-1,037
7	Morin	-0,97461	-1,237
8	Acacetin	-2,9885	-2,919
9	Diosmetin	-2,1516	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7024	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon	-2,7002	-2,919

## 12. 5,7-dihidroksi-8-isopropoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 1,6492 + (-0,3096)\mu + (0,0042073)E_b + (-0,000013818)E_e \dots(12)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7362	-2,692
2	Galagin	-1,6114	-1,855
3	Apigenin	-2,4271	-2,665
4	Kaemferol	-1,3825	-1,447
5	Luteolin	-1,7245	-1,043
6	Quercetin	-1,360	-1,037
7	Morin	-1,0399	-1,237
8	Acacetin	-2,9777	-2,919
9	Diosmetin	-2,1002	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6057	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-isopropoksi flavon	-2,7847	-2,919

## 13. 5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -8,618 + (-0,3848)\mu + (-0,00003181)E_b + (0,000007725)E_e \dots(13)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8535	-2,692
2	Galagin	-1,7486	-1,855
3	Apigenin	-2,4798	-2,665
4	Kaemferol	-1,6649	-1,447
5	Luteolin	-1,8151	-1,043
6	Quercetin	-1,5154	-1,037
7	Morin	-1,1298	-1,237
8	Acacetin	-2,577	-2,919
9	Diosmetin	-1,663	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,4188	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon	-2,8841	-2,692

## 14. 5,7-dihidroksi-8-t-butoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -7,9375 + (-0,35131)\mu + (-0,000023775)E_b + (0,000005068)E_e \dots(14)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8217	-2,692
2	Galagin	-1,7796	-1,855
3	Apigenin	-2,4936	-2,665
4	Kaemferol	-1,71	-1,447
5	Luteolin	-1,8746	-1,043
6	Quercetin	-1,5552	-1,037
7	Morin	-1,1432	-1,237
8	Acacetin	-2,5183	-2,919
9	Diosmetin	-1,6598	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,2666	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-t-butoksi flavon	-2,9274	-2,692

## 15. 5,7,8-trihidroksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 2,6467 + (-0,46276)\mu + (0,0054303)E_b + (-0,000018517)E_e \dots(15)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8847	-2,692
2	Galagin	-1,3087	-1,855
3	Apigenin	-2,5001	-2,665
4	Kaemferol	-1,0478	-1,447
5	Luteolin	-1,5418	-1,043
6	Quercetin	-1,0142	-1,037
7	Morin	-0,64782	-1,237
8	Acacetin	-3,2105	-2,919
9	Diosmetin	-2,0005	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6645	-2,496
11	5,7,8-dihidroksi flavon	-1,8284	-2,665

## 16. 5,7,2'-trihidroksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = 3,3721 + (-0,5186)\mu + (0,0054401)E_b + (-0,000017707)E_e \dots(16)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7111	-2,692
2	Galagin	-1,1025	-1,855
3	Apigenin	-2,4	-2,665
4	Kaemferol	-0,93574	-1,447
5	Luteolin	-1,4658	-1,043
6	Quercetin	-0,89812	-1,037
7	Morin	-0,65612	-1,237
8	Acacetin	-3,1692	-2,919
9	Diosmetin	-1,9654	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7122	-2,496
11	5,7,2'-dihidroksi flavon	-2,6329	-2,665



## 17. 5,7,3'-trihidroksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 3,1021 + (-0,36479) \mu + (0,0057992) E_b + (-0,000018774) E_e \dots (17)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,889	-2,692
2	Galagin	-1,439	-1,855
3	Apigenin	-2,4319	-2,665
4	Kaemferol	-1,0718	-1,447
5	Luteolin	-1,4947	-1,043
6	Quercetin	-1,0452	-1,037
7	Morin	-0,53493	-1,237
8	Acacetin	-3,1753	-2,919
9	Diosmetin	-2,0209	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6865	-2,496
11	5,7,3'-dihidroksi flavon	-1,8597	-2,665

## 18. 5,7,5'-trihidroksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 3,249 + (-0,53238) \mu + (0,0054102) E_b + (-0,000017866) E_e \dots (18)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7321	-2,692
2	Galagin	-1,0954	-1,855
3	Apigenin	-2,4232	-2,665
4	Kaemferol	-0,93525	-1,447
5	Luteolin	-1,4768	-1,043
6	Quercetin	-0,89664	-1,037
7	Morin	-0,66379	-1,237
8	Acacetin	-3,185	-2,919
9	Diosmetin	-1,9634	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7054	-2,496
11	5,7,5'-dihidroksi flavon	-2,5721	-2,665

## 19. 3-amina-5,7-dihidroksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,2148 + (-0,27766) \mu + (0,0044049) E_b + (-0,000013488) E_e \dots (19)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,6891	-2,692
2	Galagin	-1,6291	-1,855
3	Apigenin	-2,3755	-2,665
4	Kaemferol	-1,3854	-1,447
5	Luteolin	-1,7013	-1,043
6	Quercetin	-1,3652	-1,037
7	Morin	-1,0237	-1,237
8	Acacetin	-2,9714	-2,919
9	Diosmetin	-2,1349	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6793	-2,496
11	3-amina-5,7-dihidroksi flavon	-2,7953	-2,692

## 20. 8-amina-5,7-dihidroksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,4737 + (-0,12229) \mu + (0,0042806) E_b + (-0,00001164) E_e \dots(20)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,5362	-2,692
2	Galagin	-1,7896	-1,855
3	Apigenin	-2,1926	-2,665
4	Kaemferol	-1,4663	-1,447
5	Luteolin	-1,6515	-1,043
6	Quercetin	-1,4573	-1,037
7	Morin	-1,0089	-1,237
8	Acacetin	-2,7672	-2,919
9	Diosmetin	-2,1287	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6243	-2,496
11	8-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,1273	-2,692

## 21. 2'-amina-5,7-dihidroksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,0983 + (-0,22148) \mu + (0,0040765) E_b + (-0,000011975) E_e \dots(21)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,5691	-2,692
2	Galagin	-1,6648	-1,855
3	Apigenin	-2,2762	-2,665
4	Kaemferol	-1,4254	-1,447
5	Luteolin	-1,6874	-1,043
6	Quercetin	-1,4093	-1,037
7	Morin	-1,0743	-1,237
8	Acacetin	-2,8328	-2,919
9	Diosmetin	-2,1088	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6123	-2,496
11	2'-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,0896	-2,692

## 22. 3'-amina-5,7-dihidroksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,5018 + (-0,094977) \mu + (0,0041947) E_b + (-0,000011061) E_e \dots(22)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,4935	-2,692
2	Galagin	-1,8151	-1,855
3	Apigenin	-2,1545	-2,665
4	Kaemferol	-1,4881	-1,447
5	Luteolin	-1,6484	-1,043
6	Quercetin	-1,4811	-1,037
7	Morin	-1,0278	-1,237
8	Acacetin	-2,7208	-2,919
9	Diosmetin	-2,1297	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6146	-2,496
11	3'-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,1765	-2,692

## 23. 4'-amina-5,7-dihidroksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,8599 + (-0,01278)\mu + (0,0044357)E_b + (-0,000011004)E_e \dots(23)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,4856	-2,692
2	Galagin	-1,9269	-1,855
3	Apigenin	-2,0963	-2,665
4	Kaemferol	-1,5217	-1,447
5	Luteolin	-1,6202	-1,043
6	Quercetin	-1,5206	-1,037
7	Morin	-0,96149	-1,237
8	Acacetin	-2,6854	-2,919
9	Diosmetin	-2,1544	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6384	-2,496
11	4'-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,1391	-2,692

## 24. 5'-amina-5,7-dihidroksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,0896 + (-0,20804)\mu + (0,0039653)E_b + (-0,000011431)E_e \dots(24)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,5282	-2,692
2	Galagin	-1,6706	-1,855
3	Apigenin	-2,2475	-2,665
4	Kaemferol	-1,4398	-1,447
5	Luteolin	-1,6875	-1,043
6	Quercetin	-1,4247	-1,037
7	Morin	-1,1014	-1,237
8	Acacetin	-2,7945	-2,919
9	Diosmetin	-2,1065	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6017	-2,496
11	5'-amina-5,7-dihidroksi flavon	-3,1475	-2,692

## 25. 5,7-dihidroksi-3-fluoro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,1291 + (-0,26692)\mu + (0,0046323)E_b + (-0,000014508)E_e \dots(25)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8086	-2,692
2	Galagin	-1,7108	-1,855
3	Apigenin	-2,4476	-2,665
4	Kaemferol	-1,4141	-1,447
5	Luteolin	-1,7299	-1,043
6	Quercetin	-1,3947	-1,037
7	Morin	-0,98209	-1,237
8	Acacetin	-2,0505	-2,919
9	Diosmetin	-2,1702	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7085	-2,496
11	5,7-dihidroksi -3-flouro flavon	-2,333	-2,692

## 26. 5,7-dihidroksi-8-fluoro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,7695 + (-0,081226)\mu + (0,005106)E_b + (-0,000014362)E_e \dots(26)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8028	-2,692
2	Galagin	-1,9752	-1,855
3	Apigenin	-2,3277	-2,665
4	Kaemferol	-1,5015	-1,447
5	Luteolin	-1,6773	-1,043
6	Quercetin	-1,4953	-1,037
7	Morin	-0,8436	-1,237
8	Acacetin	-2,9663	-2,919
9	Diosmetin	-2,2218	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7426	-2,496
11	5,7-dihidroksi -8-flouro flavon	-2,196	-2,692

## 27. 5,7-dihidroksi-2'-fluoro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,1615 + (-0,2665)\mu + (0,0046415)E_b + (-0,000014493)E_e \dots(27)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8033	-2,692
2	Galagin	-1,707	-1,855
3	Apigenin	-2,4428	-2,665
4	Kaemferol	-1,4107	-1,447
5	Luteolin	-1,7261	-1,043
6	Quercetin	-1,3913	-1,037
7	Morin	-0,97918	-1,237
8	Acacetin	-3,0483	-2,919
9	Diosmetin	-2,1691	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7101	-2,496
11	5,7-dihidroksi -2'-flouro flavon	-2,3621	-2,692

## 28. 5,7-dihidroksi-3'-fluoro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,7469 + (-0,10751)\mu + (0,0050913)E_b + (-0,000014506)E_e \dots(28)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8012	-2,692
2	Galagin	-1,9294	-1,855
3	Apigenin	-2,3379	-2,665
4	Kaemferol	-1,476	-1,447
5	Luteolin	-1,6727	-1,043
6	Quercetin	-1,468	-1,037
7	Morin	-0,8437	-1,237
8	Acacetin	-2,9785	-2,919
9	Diosmetin	-2,209	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7382	-2,496
11	5,7-dihidroksi -3'-flouro flavon	-2,2955	-2,692

## 29. 5,7-dihidroksi-4'-fluoro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,7193 + (-0,11862)\mu + (0,0050715)E_b + (-0,000014536)E_e \dots (29)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8011	-2,692
2	Galagin	-1,9121	-1,855
3	Apigenin	-2,3439	-2,665
4	Kaemferol	-1,4686	-1,447
5	Luteolin	-1,6738	-1,043
6	Quercetin	-1,4598	-1,037
7	Morin	-0,84866	-1,237
8	Acacetin	-2,9835	-2,919
9	Diosmetin	-2,2049	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,736	-2,496
11	5,7-dihidroksi -4'-flouro flavon	-2,3178	-2,692

## 30. 5,7-dihidroksi-5'-fluoro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,281 + (-0,24997)\mu + (0,004704)E_b + (-0,000014473)E_e \dots (30)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7903	-2,692
2	Galagin	-1,7187	-1,855
3	Apigenin	-2,4202	-2,665
4	Kaemferol	-1,4072	-1,447
5	Luteolin	-1,7101	-1,043
6	Quercetin	-1,389	-1,037
7	Morin	-0,95628	-1,237
8	Acacetin	-3,0338	-2,919
9	Diosmetin	-2,1674	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7117	-2,496
11	5,7-dihidroksi -5'-flouro flavon	-2,4453	-2,692

## 31. 5,7-dihidroksi-3-kloro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,284 + (-0,24367)\mu + (0,0043421)E_b + (-0,000012915)E_e \dots (31)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,6373	-2,692
2	Galagin	-1,6547	-1,855
3	Apigenin	-2,3239	-2,665
4	Kaemferol	-1,4005	-1,447
5	Luteolin	-1,6866	-1,043
6	Quercetin	-1,3828	-1,037
7	Morin	-1,0273	-1,237
8	Acacetin	-2,9137	-2,919
9	Diosmetin	-2,1289	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6629	-2,496
11	5,7-dihidroksi -3-kloro flavon	-2,9315	-2,692

## 32. 5,7-dihidroksi-8-kloro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,489 + (-0,23867)\mu + (0,0046677)E_b + (-0,000013913)E_e \dots\dots(32)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7205	-2,692
2	Galagin	-1,6945	-1,855
3	Apigenin	-2,3661	-2,665
4	Kaemferol	-1,396	-1,447
5	Luteolin	-1,6861	-1,043
6	Quercetin	-1,3785	-1,037
7	Morin	-0,96261	-1,237
8	Acacetin	-2,9889	-2,919
9	Diosmetin	-2,159	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7147	-2,496
11	5,7-dihidroksi -8-kloro flavon	-2,6831	-2,692

## 33. 5,7-dihidroksi-2'-kloro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,2802 + (-0,23857)\mu + (0,0043172)E_b + (-0,000012786)E_e \dots\dots(33)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,6269	-2,692
2	Galagin	-1,658	-1,855
3	Apigenin	-2,315	-2,665
4	Kaemferol	-1,4039	-1,447
5	Luteolin	-1,6851	-1,043
6	Quercetin	-1,3865	-1,037
7	Morin	-1,0312	-1,237
8	Acacetin	-2,902	-2,919
9	Diosmetin	-2,1271	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,658	-2,496
11	5,7-dihidroksi -2'-kloro flavon	-2,9561	-2,692

## 34. 5,7-dihidroksi-3'-kloro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,3956 + (-0,25503)\mu + (0,0045759)E_b + (-0,000013776)E_e \dots\dots(34)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,71	-2,692
2	Galagin	-1,6678	-1,855
3	Apigenin	-2,3713	-2,665
4	Kaemferol	-1,3907	-1,447
5	Luteolin	-1,692	-1,043
6	Quercetin	-1,3721	-1,037
7	Morin	-0,98529	-1,237
8	Acacetin	-2,9854	-2,919
9	Diosmetin	-2,1508	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,704	-2,496
11	5,7-dihidroksi -3'-kloro flavon	-2,7207	-2,692

## 35. 5,7-dihidroksi-4'-kloro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,3611 + (-0,26109)\mu + (0,0045405)E_b + (-0,000013718)E_e \dots(35)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7057	-2,692
2	Galagin	-1,6578	-1,855
3	Apigenin	-2,373	-2,665
4	Kaemferol	-1,3889	-1,447
5	Luteolin	-1,6943	-1,043
6	Quercetin	-1,3699	-1,037
7	Morin	-0,99424	-1,237
8	Acacetin	-2,9839	-2,919
9	Diosmetin	-2,1479	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7001	-2,496
11	5,7-dihidroksi -4'-kloro flavon	-2,7342	-2,692

## 36. 5,7-dihidroksi-5'-kloro flavon

$$\log (1/IC_{50}) = 2,1969 + (-0,2484)\mu + (0,0041781)E_b + (-0,000012386)E_e \dots(36)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,5972	-2,692
2	Galagin	-1,6347	-1,855
3	Apigenin	-2,3069	-2,665
4	Kaemferol	-1,4063	-1,447
5	Luteolin	-1,6917	-1,043
6	Quercetin	-1,3882	-1,037
7	Morin	-1,0677	-1,237
8	Acacetin	-2,882	-2,919
9	Diosmetin	-2,12	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6458	-2,496
11	5,7-dihidroksi -5'-kloro flavon	-3,0094	-2,692

## B. Menggunakan deskriptor molekuler hasil optimasi Ab Initio basis set 6-31G

## 1. Senyawa turunan flavon/flavonol

$$\log (1/IC_{50}) = -11,49 + (-0,25622)\mu + (-0,000067319)E_b + (0,0000119793)E_e \dots(37)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8393	-2,692
2	Galagin	-2,021	-1,855
3	Apigenin	-2,239	-2,665
4	Kaemferol	-1,6507	-1,447
5	Luteolin	-1,5197	-1,043
6	Quercetin	-1,2972	-1,037
7	Morin	-1,0812	-1,237
8	Acacetin	-2,6852	-2,919
9	Diosmetin	-1,8407	-2,667

10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,8841	-2,496
----	---------------------------------------	---------	--------

## 2. 5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = -11,1 + (-0,26972)\mu + (-0,000063616)E_b + (0,000018548)E_e \dots(38)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,821	-2,692
2	Galagin	-1,9757	-1,855
3	Apigenin	-2,2601	-2,665
4	Kaemferol	-1,6493	-1,447
5	Luteolin	-1,5441	-1,043
6	Quercetin	-1,3107	-1,037
7	Morin	-1,0737	-1,237
8	Acacetin	-2,6864	-2,919
9	Diosmetin	-1,825	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,8596	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-metoksi flavon	-2,7443	-2,692

## 3. 5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = -10,278 + (-0,28066)\mu + (-0,0000557)E_b + (0,000015924)E_e \dots(39)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7749	-2,692
2	Galagin	-1,9099	-1,855
3	Apigenin	-2,2868	-2,665
4	Kaemferol	-1,6546	-1,447
5	Luteolin	-1,5933	-1,043
6	Quercetin	-1,3421	-1,037
7	Morin	-1,072	-1,237
8	Acacetin	-2,6614	-2,919
9	Diosmetin	-1,7965	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7741	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-metoksi flavon	-2,8845	-2,692

## 4. 5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = -10,014 + (-0,30323)\mu + (-0,00005215)E_b + (0,000014644)E_e \dots(40)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7882	-2,692
2	Galagin	-1,8677	-1,855
3	Apigenin	-2,3365	-2,665
4	Kaemferol	-1,659	-1,447
5	Luteolin	-1,6293	-1,043
6	Quercetin	-1,3549	-1,037
7	Morin	-1,0485	-1,237
8	Acacetin	-2,6905	-2,919
9	Diosmetin	-1,7831	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7659	-2,496



11	5,7-dihidroksi-3-etoksi flavon	-2,8264	-2,692
----	--------------------------------	---------	--------

## 5. 5,7-dihidroksi-8-etoksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = -9,0082 + (-0,30927)\mu + (-0,000041388)E_b + (0,000011039)E_e \quad (41)$$

No	Senyawa	$\log (1/IC_{50})$ pred.	$\log (1/IC_{50})$ eksp.
1	Khrisin	-2,7481	-2,692
2	Galagin	-1,8111	-1,855
3	Apigenin	-2,3827	-2,665
4	Kaemferol	-1,6806	-1,447
5	Luteolin	-1,7059	-1,043
6	Quercetin	-1,4015	-1,037
7	Morin	-1,047	-1,237
8	Acacetin	-2,6564	-2,919
9	Diosmetin	-1,7522	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6325	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-etoksi flavon	-2,9321	-2,692

## 6. 5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = -9,6131 + (-0,31538)\mu + (-0,000047285)E_b + (0,00001296)E_e \quad (42)$$

No	Senyawa	$\log (1/IC_{50})$ pred.	$\log (1/IC_{50})$ eksp.
1	Khrisin	-2,7864	-2,692
2	Galagin	-1,8337	-1,855
3	Apigenin	-2,3758	-2,665
4	Kaemferol	-1,6683	-1,447
5	Luteolin	-1,6698	-1,043
6	Quercetin	-1,3736	-1,037
7	Morin	-1,034	-1,237
8	Acacetin	-2,6949	-2,919
9	Diosmetin	-1,7671	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7201	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-propoksi flavon	-2,8262	-2,692

## 7. 5,7-dihidroksi-8-propoksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = -8,6556 + (-0,32181)\mu + (-0,000036659)E_b + (0,0000093787)E_e \quad (43)$$

No	Senyawa	$\log (1/IC_{50})$ pred.	$\log (1/IC_{50})$ eksp.
1	Khrisin	-2,7558	-2,692
2	Galagin	-1,783	-1,855
3	Apigenin	-2,4284	-2,665
4	Kaemferol	-1,693	-1,447
5	Luteolin	-1,7494	-1,043
6	Quercetin	-1,4206	-1,037
7	Morin	-1,0302	-1,237
8	Acacetin	-2,6665	-2,919
9	Diosmetin	-1,7384	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,5891	-2,496

11	5,7-dihidroksi-8-propoksi flavon	-2,8956	-2,692
----	----------------------------------	---------	--------

## 8. 5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = -9,2012 + (-0,32648)\mu + (-0,000042968)E_b + (0,000011497)E_e \quad (44)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7752	-2,692
2	Galagin	-1,798	-1,855
3	Apigenin	-2,4051	-2,665
4	Kaemferol	-1,6754	-1,447
5	Luteolin	-1,7043	-1,043
6	Quercetin	-1,3938	-1,037
7	Morin	-1,0298	-1,237
8	Acacetin	-2,6968	-2,919
9	Diosmetin	-1,755	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6856	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-isopropoksi flavon	-2,8311	-2,692

## 9. 5,7-dihidroksi-8-isopropoksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = -8,3345 + (-0,32565)\mu + (-0,000033208)E_b + (0,0000082182)E_e \quad (45)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7463	-2,692
2	Galagin	-1,7641	-1,855
3	Apigenin	-2,4477	-2,665
4	Kaemferol	-1,7017	-1,447
5	Luteolin	-1,7769	-1,043
6	Quercetin	-1,4379	-1,037
7	Morin	-1,0308	-1,237
8	Acacetin	-2,6611	-2,919
9	Diosmetin	-1,7306	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,5524	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-isopropoksi flavon	-2,9004	-2,692

## 10. 5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon

$$\log (1/IC_{50}) = -8,5751 + (-0,33946)\mu + (-0,000035728)E_b + (0,0000090221)E_e \quad (46)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7665	-2,692
2	Galagin	-1,7551	-1,855
3	Apigenin	-2,4567	-2,665
4	Kaemferol	-1,6928	-1,447
5	Luteolin	-1,7647	-1,043
6	Quercetin	-1,4268	-1,037
7	Morin	-1,0199	-1,237
8	Acacetin	-2,6959	-2,919
9	Diosmetin	-1,736	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6134	-2,496

11	5,7-dihidroksi-3-t-butoksi flavon	-2,822	-2,692
----	-----------------------------------	--------	--------

## 11. 5,7-dihidroksi-8-t-butoksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -7,6367 + (-0,33196)\mu + (-0,000024872)E_b + (0,0000053781)E_e \quad (47)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,7382	-2,692
2	Galagin	-1,7337	-1,855
3	Apigenin	-2,5025	-2,665
4	Kaemferol	-1,7286	-1,447
5	Luteolin	-1,8481	-1,043
6	Quercetin	-1,4789	-1,037
7	Morin	-1,0268	-1,237
8	Acacetin	-2,6503	-2,919
9	Diosmetin	-1,7134	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,4547	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-t-butoksi flavon	-2,8748	-2,692

## 12. 5,7,8-trihidroksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -13,368 + (-0,0004163)\mu + (-0,00008350)E_b + (0,00002564)E_e \quad (48)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,857	-2,692
2	Galagin	-2,5691	-1,855
3	Apigenin	-1,9547	-2,665
4	Kaemferol	-1,7522	-1,447
5	Luteolin	-1,3866	-1,043
6	Quercetin	-1,2722	-1,037
7	Morin	-1,2732	-1,237
8	Acacetin	-2,3865	-2,919
9	Diosmetin	-1,9701	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6306	-2,496
11	5,7,8-trihidroksi flavon	-2,6977	-2,692

## 13. 3-amina-5,7-dihidroksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -11,384 + (-0,2599)\mu + (-0,000066463)E_b + (0,000019513)E_e \quad (49)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8323	-2,692
2	Galagin	-2,0078	-1,855
3	Apigenin	-2,2425	-2,665
4	Kaemferol	-1,6495	-1,447
5	Luteolin	-1,5247	-1,043
6	Quercetin	-1,3008	-1,037
7	Morin	-1,0809	-1,237
8	Acacetin	-2,6852	-2,919
9	Diosmetin	-1,837	-2,667

10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,8805	-2,496
11	3-amina-5,7-dihidroksi flavon	-2,7086	-2,692

## 14. 8-amina-5,7-dihidroksi flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -13,355 + (0,001941)\mu + (-0,00008338)E_b + (0,00002561)E_e \quad (50)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,8552	-2,692
2	Galagin	-2,5725	-1,855
3	Apigenin	-1,9526	-2,665
4	Kaemferol	-1,7537	-1,447
5	Luteolin	-1,3872	-1,043
6	Quercetin	-1,2735	-1,037
7	Morin	-1,2759	-1,237
8	Acacetin	-2,3825	-2,919
9	Diosmetin	-1,9708	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,6252	-2,496
11	8-amina-5,7-dihidroksi flavon	-2,701	-2,692

## 15. 5,7-dihidroksi-3-fluoro flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -10,359 + (-0,31033)\mu + (-0,000051287)E_b + (0,000014123)E_e \quad (51)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,9181	-2,692
2	Galagin	-1,9514	-1,855
3	Apigenin	-2,4519	-2,665
4	Kaemferol	-1,7311	-1,447
5	Luteolin	-1,713	-1,043
6	Quercetin	-1,4016	-1,037
7	Morin	-1,0537	-1,237
8	Acacetin	-2,7818	-2,919
9	Diosmetin	-1,8328	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,7985	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-fluoro flavon	-2,1162	-2,692

## 16. 5,7-dihidroksi-8-fluoro flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -11,256 + (-0,11863)\mu + (-0,000055019)E_b + (0,000015565)E_e \quad (52)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,98	-2,692
2	Galagin	-2,3883	-1,855
3	Apigenin	-2,3356	-2,665
4	Kaemferol	-1,8717	-1,447
5	Luteolin	-1,7198	-1,043
6	Quercetin	-1,4471	-1,037

7	Morin	-1,2062	-1,237
8	Acacetin	-2,5764	-2,919
9	Diosmetin	-1,9405	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,5146	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-fluoro flavon	-1,7698	-2,692

## 17. 5,7-dihidroksi-3-kloro flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -3,9155 + (-0,39145)\mu + (0,000006639)E_b + (-0,0000047809)E_e(53)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,5606	-2,692
2	Galagin	-1,4887	-1,855
3	Apigenin	-2,6623	-2,665
4	Kaemferol	-1,8254	-1,447
5	Luteolin	-2,1249	-1,043
6	Quercetin	-1,7274	-1,037
7	Morin	-1,1819	-1,237
8	Acacetin	-2,6431	-2,919
9	Diosmetin	-1,7068	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,2887	-2,496
11	5,7-dihidroksi-3-kloro flavon	-2,5401	-2,692

## 18. 5,7-dihidroksi-8-kloro flavon

$$\log(1/IC_{50}) = -3,3402 + (-0,36674)\mu + (0,000012607)E_b + (-0,0000066902)E_e(54)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	Khrisin	-2,5315	-2,692
2	Galagin	-1,5138	-1,855
3	Apigenin	-2,6664	-2,665
4	Kaemferol	-1,8616	-1,447
5	Luteolin	-2,1738	-1,043
6	Quercetin	-1,773	-1,037
7	Morin	-1,2237	-1,237
8	Acacetin	-2,5914	-2,919
9	Diosmetin	-1,7118	-2,667
10	5,7-dihidroksi-3',4'-dimetoksi flavon	-2,1802	-2,496
11	5,7-dihidroksi-8-kloro flavon	-2,5226	-2,692

## 19. Seyawa flavanon

## a. Hasil optimasi RM1

$$\log(1/IC_{50}) = -1,827 + (-0,20483)\mu + (0,0027419)E_b + (-0,000013244)E_e \dots(55)$$

No	Senyawa	log (1/IC <sub>50</sub> ) pred.	log (1/IC <sub>50</sub> ) eksp.
1	taksifolin	-0,74927	-0,967
2	hesperitin	-1,8441	-1,855

## b. Hasil optimasi Ab Initio dengan basis set 6-31G

$$\log(1/IC_{50}) = -7,4613 + (-0,14063)\mu + (-0,000020563)E_b + (0,0000041759)E_e(56)$$

No	Senyawa	$\log(1/IC_{50})$ pred.	$\log(1/IC_{50})$ eksp.
1	taksifolin	-1,1425	-0,967
2	hesperitin	-1,9693	-1,855