

BAB I

PENDAHULUAN

Radikal bebas adalah suatu molekul yang relatif tidak stabil dengan atom yang pada orbital terluarnya memiliki satu atom atau lebih elektron yang tidak berpasangan.¹ Di antaranya molekul hidrogen, logam-logam transisi, dan molekul oksigen. Kemunculan satu atau lebih elektron tak berpasangan menyebabkan molekul ini mudah tertarik pada suatu medan magnetik (paramagnetik) dan menyebabkan molekul sangat reaktif.² Sadikin (2008:17) menjelaskan bahwa aksi dari radikal bebas akan berakibat deskruftif bagi molekul sel lain yang elektronnya diambil yang akan menimbulkan reaksi berantai sehingga radikal bebas terlahir semakin banyak. Jika radikal bebas tidak diinaktivasi, reaktivitasnya dapat merusak seluruh tipe makromolekul seluler, termasuk karbohidrat, protein, lipid dan asam nukleat.³

Sumber pemicu dari radikal bebas ada yang bersifat internal yaitu dari dalam tubuh dan ada yang bersifat eksternal atau dari luar tubuh. Misalnya di dalam tubuh yang diperoleh dari oksigen yang kita hirup, oksigen yang biasa kita hirup merupakan penunjang utama bagi kehidupan, karena menghasilkan banyak energi, namun produk sampingan dari reaksi pembentukan energi tersebut menghasilkan *Reactive Oxygen Species* (ROS). (Lehninger, 1982:165) Radikal bebas dari luar tubuh manusia dapat berasal dari polusi udara, alkohol, rokok, radiasi ultraviolet dan obat-obatan tertentu.⁴

Antioksidan dapat menstabilkan radikal bebas dan melengkapi kekurangan elektron yang memiliki radikal bebas, serta menghambat terjadinya reaksi berantai dari pembentukan radikal bebas yang dapat menimbulkan stress oksidatif.⁵ Hal ini menyebabkan penelitian dan penggunaan antioksidan alami semakin meningkat. Salah satu sumber kandungan antioksidan yang tinggi adalah buah lemon. Masyarakat kini banyak mengonsumsi olahan dari buah lemon, karena memiliki banyak manfaat untuk kesehatan dan kecantikan.

Jeruk lemon umumnya dikenal sebagai lemon, milik keluarga Rutaceae dan tumbuh di negara-negara Asia Selatan. Lemon kaya akan suplemen nutrisi, mengandung karbohidrat, lemak, protein, vitamin seperti tiamin, riboflavin, niasin, asam pantotenat, asam folat, kolin, dan kaya akan vitamin C. Lemon juga mengandung unsur-unsur seperti kalsium, magnesium, kalium dan seng, serta beberapa senyawa fitokimia seperti tanin dan flavonoid.⁵

Sudah banyak ditemukan penelitian mengenai buah lemon tentang pengujian khasiat antioksidan, dan pencarian senyawa yang aktif secara konvensional dalam suatu basis data yang terdiri dari jutaan senyawa tentu akan memerlukan sumber daya yang besar dan memakan waktu yang lama. Namun dengan menggunakan pendekatan pemodelan farmakofor dan *molecular docking*, pencarian senyawa aktif akan jauh lebih efisien dan memerlukan biaya yang murah dan waktu yang relatif lebih cepat.

Dalam penelitian ini, untuk mengetahui senyawa aktif yang memiliki aktivitas dari buah lemon (*Citrus limon L.*), maka dilakukan studi farmakofor dan penambatan molekul dengan menggunakan metode komputasi kimia. Interaksi dari

senyawa utama buah lemon (*Citrus limon* L.) dengan reseptor dari antioksidan (*enzim* monoamine oksidase B) dapat divisualisasikan dengan metode komputasi dan dapat digunakan untuk mengetahui *pharmacophore* dari suatu senyawa.

Manfaat dari penelitian ini adalah untuk memberikan informasi calon senyawa baru yang diduga memiliki aktivitas antioksidan yang berasal dari senyawa aktif buah lemon yang dapat menjadi alternatif sumber bahan baku obat. Sehingga dapat membantu dalam bidang pengembangan obat dan memberikan manfaat bagi masyarakat dengan potensi efek terapi yang maksimal atau lebih dari pada ligan pembanding tetapi memiliki efek samping yang lebih kecil, serta dapat dimanfaatkan untuk penelitian selanjutnya.

