

0937

LAPORAN PENELITIAN DANA RUTIN 1997/1998
KONTRAK NO . 036/ RUTIN/VIII/1997

STUDI STRUKTUR MOLEKUL DAN ELEKTRONIK SENYAWA BENZ(C)
ANTRASEN DAN BENZ(C) ANTRASEN DIOL EPOKSIDA

Oleh:

DRS EMDENIZ MS
DRA REFINEL MS
DR THERESIA SITA KUSUMA



DEPARTEMEN PENDIDIKAN DAN KEBUDAYAAN
LEMBAGA PENELITIAN UNIVERSITAS ANDALAS
DIBIAYAI DENGAN DANA RUTIN UNIVERSITAS
ANDALAS

STUDI STRUKTUR MOLEKUL DAN ELEKTRONIK SENYAWA BENZ (C)
ANTRASEN DAN BENZ(C) ANTRASEN DIOL EPOKSIDA

Drs Emdeniz MS, Dra Refinel MS, DR Theresia Sita Kusuma, Jurusan Kimia Fmipa
Unand, Rutin 1997/98

ABSTRAK

Senyawa benz(c) antrasen dan 1,2,3,4-tetra hidro 3,4-dihidroksi benz (c) antrasen 1,2- epoksida mempunyai daerah teluk dengan cfek sterik yang cukup berarti ,sehingga molekul tidak planar. Diastereomer syn quasidiekuatorial mempunyai energi total (E_T) lebih rendah dan lebih stabil dibandingkan dengan anti quasidiekuatorial yaitu $-235,00008$ eV dan $-234,81504$ eV. Pembentukan diol epoksida didaerah teluk senyawa benz(c) antrasen sangat mempengaruhi struktur molekul nya, dimana struktur molekul cincin tidak jenuh lebih meyerupai struktur molekul antrasen dibandingkan dengan benz(c) antrasen. Jarak C_1 dengan O cincin oksiran pada bentuk syn lebih pendek dibandingkan dengan untuk bentuk anti. Tingkat energi E_{LUMO} , E_{HOMO} , ΔE untuk syn quasidiekuatorial dan anti quasidiekuatorial berturut adalah $-11,89543$ eV , $-12,93340$ eV , $1,03797$ eV dan $-11,47221$ eV, $-12,22933$ eV, $0,75712$ eV. Diastereomer anti quasidiekuatorial diramalkan lebih mudah mengalami reaksi oksidasi reduksi dibandingkan dengan bentuk syn quasidiekuatorial.

PENDAHULUAN

Senyawa hidrokarbon aromatik polisiklik (HKAP) relatif banyak didapatkan di alam. Senyawa ini umumnya terbentuk pada proses pembentukan minyak bumi dan batu bara. Di lingkungan kehidupan manusia, HKAP ditemukan pada asap rokok, gas buangan kendaraan bermotor dan proses pengolahan dan pemakaian batu bara. Di samping itu, juga ditemukan dalam bahan makanan yang umumnya masuk melalui bahan aditif dalam pembuatan makanan, proses pengolahan dan pengepakannya terutama bila semuanya ini dilakukan di lingkungan yang tingkat polusi udaranya tinggi.

Senyawa HKAP sangat berpotensi karsinogen, terutama yang mempunyai cincin lebih besar dari tiga dan mempunyai daerah "teluk". Didalam tubuh, HKAP akan membentuk metabolit berupa epoksida, diol epoksida, radikal kation, semikuinon dan ion karbonium. Selanjutnya senyawa ini akan berikatan dengan DNA, sehingga akan terjadi mutagen yang mengakibatkan timbulnya penyakit kanker dan tumor.

Menurut hasil penelitian yang telah dilakukan terhadap beberapa senyawa kimia, didapatkan bahwa kereaktifan kimia, aktifitas biokimia, laju penyerapan dan serta biotransformasinya dalam tubuh sangat ditentukan oleh kimia senyawa tersebut. Distribusi elektronik dalam senyawa HKAP tidak merata, tergantung pada struktur molekulnya, letak dan jenis substituenya. Keadaan ini juga sangat menentukan pada pembentukan metabolit aktifnya. Oleh karena itu, perlu ditentukan struktur molekul dan elektronik senyawa HKAP yang berpotensi karsinogen.

Pada penelitian ini dilakukan ditentukan struktur molekul dan elektronik senyawa benz(c)antrasen dan benz(c) antrasen diol epoksida . Penelitian ini adalah penelitian semiempiris,dimana struktur molekul senyawa yang diteliti ditentukan dengan menggunakan metoda Calzaferri.

TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN

Penelitian ini bertujuan untuk memberikan gambaran dari struktur molekul dan keadaan elektronik senyawa benz(c) antrasen dan benz(c) antrasen diol epoksida. Dari penelitian ini dapat dilihat perubahan struktur molekul dan elektronik akibat pembentukan diol epoksida . Dari bentuk diol epoksida yang mungkin terbentuk dapat diramalkan bentuk isomer diol epoksida yang stabil dan kemudahannya mengalami proses oksidasi reduksi.

TINJAUAN PUSTAKA

Senyawa hidrokarbon aromatik polisiklis (HKAP) relatif banyak ditemukan di alam, terutama pada lingkungan yang tingkat polusi kimiawinya yang tinggi. Senyawa ini ditemukan pada asap rokok, gas buangan kendaraan bermotor, pada proses pengolahan dan pemakaian minyak bumi dan batu bara, serta pada bahan makanan. HKAPsangat berpotensi sebagai penyebab timbulnya penyakit kanker, terutama senyawa HKAP yang mempunyai cincin lebih besar dari tiga dan mempunyai daerah teluk. Contohnya senyawa benz(a) pyren , ben(c) antrasen dan ben (c)fenantren. Potensi ini akan muncul sebagai akibat terbentuknya metabolit selama metabolisme dalam tubuh. Metabolit yang terbentuk ada yang aktif dan adapula yang tidak aktif. Metabolit ini dikatakan aktif apabila mampu

METODA PENELITIAN

Pada penelitian ini cincin tidak jenuh dari molekulnya dianggap planar. Diol epoksida nya syn dan anti quasicuatorial dengan cincin oksiran terletak pada daerah teluk. Penelitian ini hanya dilakukan terhadap senyawa benz (c) antrasen dan 1,2,3,4-tetra hidro-3,4-dihidroksi benz (c) antrasen 1,2 epoksida. Struktur molekul ditentukan dengan menggunakan metoda Calzaferri (Program Kimia Kuantum No.116). Pada metoda ini dilakukan optimasi geometri molekul (secara manual). Keadaan optimal ditandai apabila dalam perhitungan yang dihasilkan didapatkan nilai energi total (E_T) minimum. Pada keadaan ini ditentukan nilai E_{LUMO} dan E_{HOMO} serta ΔE yakni $E_{LUMO} - E_{HOMO}$, jarak ikatan serta sudut ikatan molekul yang diamati. Dari nilai energi total dan ΔE ini diramalkan kestabilan molekul dan tingkat kemudahan molekul mengalami reaksi oksidasi reduksi.

HASIL DAN DISKUSI

Dari penelitian yang telah dilakukan terhadap senyawa benz(c)antrasen dengan menganggap molekul planar, didapatkan bahwa daerah teluk mempunyai halangan ruang yang cukup berarti. Hal ini terlihat pada jarak antara atom hidrogen yang terikat pada atom C_{12} dengan yang terikat pada atom C_1 yang hanya 1.933 \AA . Hal ini dapat dibandingkan dengan jarak antara atom H yang terikat pada atom C_{11} dan C_{12} yakni 2.474 \AA . Keadaan ini akan menyebabkan molekul tidak stabil dan mempunyai energi total tinggi. Hal ini terlihat jelas pada penelitian terhadap senyawa 1,2,3,4 - tetrahidro 3,4-dihidroksi benz(c)

KESIMPULAN DAN SARAN

Dari penelitian semi empiris yang telah dilakukan terhadap senyawa benz(c) antrasen dan 1,2,3,4-tetrahidroksi 3,4-dihidro benz(c) antrasen 1,2-epoksida didapatkan bahwa pembentukan diol epoksida sangat mempengaruhi struktur molekul senyawa tersebut. Berdasarkan perhitungan energi total, E_{sumo} , E_{homo} , ΔE dan panjang ikatan C-O pada cincin oksiran, diastereomer bentuk syn quasidiekuatorial lebih stabil dan sulit mengalami reaksi oksidasi-reduksi dibandingkan dengan bentuk anti quasidiekuatorial.

Untuk lebih lengkapnya data tentang benz(c) antrasen diol epoksida yang mungkin terbentuk pada metabolisme benz(c) antrasen dalam tubuh dengan sasaran akhirnya adalah mencari antikarsinogen senyawa ini, maka disarankan untuk mempelajari struktur molekul benz(c) antrasen diol lainnya terutama untuk bentuk isomer yang berhubungan dengan tempat terikatnya cincin oksiran, gugus hidroksi dengan bentuk quasi axial dan quasidiekuatorial.

DAFTAR PUSTAKA

- Agarwal R. et.al. 1996. Benzo(c) phenanthrene-DNA Adducts in Mouse Epidermis in Relation to the Tumorigenicities of Four Configurational Isomeric 3,4-Dihydrodiol 1,2 epoxides, Chem. Res. Toxicol. 9, 586-592.
- Lewis L. et.al. 1995. Quantum Mechanical Studies of Structure and Reactivities of diol Epoxides of benzo(c) phenanthrene. Chem. res. Toxicol. 8, 499-505.
- Calzaferri G., Brandle M. 1992, Quantum Chemistry Program Exchange (QCPE Program No. 116), Indiana University, .Bern.
- Chen A., Singer B. 1995, Large Scale Synthesis of p-Benzoquinone-2 Deoxycytidine and p-Benzoquinone-2 Deoxyadenosine Adducts and Their Site Specific Incorporation into DNA Oligonucleotides, Chem. Res. Toxicol. 8, 865-874.
- Dubowska W.B. et.al. 1996, The Effect of Fluoro Substituents on Reactivity of 7-Methyl benz(a) anthracene Diol Epoxides. Chem. Res. Toxicol. 9, 722-728.