


No	15	
Nama	MUSYRIAH HANUM	
No Mhs	97/112394/PA/6818	
Pembimbing I	Dr. Mudasir, M.Eng	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Skripsi	ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF ANTARA STRUKTUR DAN AKTIVITAS FUNGISIDA TURUNAN 1,2,4-THIADIAZOLIN BERDASARKAN PARAMETER ELEKTRONIK HASIL PERHITUNGAN METODE AM1 DAN PM3	
Abstrak	<p>Telah dianalisis hubungan kuantitatif struktur–aktivitas fungisida dari satu seri senyawa 1,2,4-thiadiazolin yang didasarkan pada muatan bersih atom-atom senyawa tersebut. Perhitungan muatan bersih atom dari senyawa 1,2,4-thiadiazolin ini dilakukan dengan menggunakan metode AM1 dan PM3, sedangkan aktivitas biologi senyawa tersebut diperoleh dari data sekunder dan dinyatakan dalam pEC₅₀ untuk jamur pada tanaman ketimun. Perhitungan hubungan antara muatan atom dan aktivitas fungisida telah dilakukan dengan menggunakan analisis regresi multilinier.</p> <p>Hasil analisis memberikan model persamaan QSAR terbaik untuk metode AM1 adalah :</p> $pEC_{50} = 48,76 + -571,23qC_4 + 1627,00qC_6 + -216,70qN_2$ <p>n=18, r²=0.445, SE=0,332, F_{hitung}/F_{tabel} = 1,117, PRESS=-0,333 ; sig = 95%</p> <p>sedangkan untuk metode PM3 adalah:</p> $pEC_{50} = -80,22 + -1281,52qC_1 + 8974,66qC_5 + -6957,99qC_6 + -5826,72qC_8 + 278,82qC_9 + -2927,09qN_2 + -46,19qN_3 + -24,37qC_{14}$ <p>n=18, r²=0,868, SE=0,202, F_{hitung}/F_{tabel} =2,282, PRESS=1,782; sig = 95%</p> <p>Komparasi dua metode tersebut menunjukkan bahwa penggunaan metode PM3 relatif lebih akurat dibandingkan AM1. Berdasarkan persamaan QSAR terbaik yang diperoleh dari perhitungan muatan bersih atom dengan metoda PM3, maka telah didesain 15 senyawa turunan 1,2,4-thiadiazolin baru yang beberapa di antaranya menurut perhitungan model QSAR terbaik memiliki harga pEC₅₀ relatif baik.</p>	