


No	12	
Nama	<b>IDA PUJIASTUTI</b>	
No Mhs	98/121262/PA/7470	
Pembimbing I	Dr. Mudasir, M.Eng	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Skripsi	<b>ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF ANTARA STRUKTUR DAN AKTIVITAS FUNGISIDA TURUNAN 1,2,4-THIADIAZOLIN BERDASARKAN PARAMETER ORBITAL MOLEKUL</b>	
Abstrak	<p>Telah dilakukan analisis Hubungan Kuantitatif antara Struktur dan Aktivitas (HKSA) fungisida dari satu seri senyawa turunan 1,2,4-thiadiazolin dengan didasarkan pada perhitungan sifat fisik kimia senyawa. Perhitungan sifat fisikokimia dilakukan dengan menggunakan metoda semi-empirik AM1 dan PM3 sedangkan aktivitas senyawa diperoleh dari literatur. Analisis hubungan antara aktivitas fungisida dan sifat fisikokimia senyawa yang diperoleh dari perhitungan orbital molekul dilakukan dengan program SPSS. Hasil analisis HKSA didapatkan masing-masing 1 model persamaan terbaik untuk metode AM1 dan PM3 yang dapat dijabarkan sebagai berikut:</p> <p>Metode AM1:</p> $pEC_{50} = 3,842 + (1,807 \cdot 10^{-4}) E_T + (5,841 \cdot 10^{-3}) E_b - (5,689 \cdot 10^{-2}) \Delta H_f - 0,770 \log P + 1,144 \alpha - 0,671 \mu + 9,568 \text{ GLOB} - (5,54 \cdot 10^{-2}) \text{ MR}$ <p>n=19; m=8; r=0,917; r<sup>2</sup>=0,840; SE=0,216; F<sub>hitung</sub>/F<sub>tabel</sub>=2,459; PRESS=0,469</p> <p>Metode PM3:</p> $pEC_{50} = -11,288 - 3,027 E_{\text{HOMO}} + (5,938 \cdot 10^{-4}) E_T + (7,432 \cdot 10^{-3}) E_b - (9,81 \cdot 10^{-5}) E_e - 3,143 \log P - 1,622 \alpha - 0,526 \text{ GLOB} + 0,714 \text{ MR} + 3,665 \log K_{oc}$ <p>n=19; m=9; r=0,878; r<sup>2</sup>=0,770; SE=0,272; F<sub>hitung</sub>/F<sub>tabel</sub>=1,054; PRESS=0,703</p> <p>Model yang diperoleh selanjutnya dijadikan acuan dalam merancang dan memprediksikan aktivitas senyawa fungisida baru. Hasil prediksi aktivitas menunjukkan bahwa 2 senyawa fungisida baru yaitu senyawa dengan substituen 3-Me-4-CF<sub>3</sub>, 2,3-Me-4-F merupakan senyawa fungisida yang cukup menjanjikan untuk disintesis. Dari hasil penelitian dapat ditunjukkan bahwa analisis HKSA berdasar parameter molekular merupakan analisis yang efektif dalam meramalkan variabel yang mempengaruhi senyawa fungisida dan untuk pengembangan senyawa fungisida baru.</p>	