


No	5	
Nama	ARI WULANDARI	
No Mhs	01/151062/EPA/041	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Pembimbing II	Dr. Harno Dwi Pranowo, M.Si	
Skripsi	ANALISIS HUBUNGAN STRUKTUR ELEKTRONIK DAN AKTIVITAS SENYAWA BENZENASULFONILAMIDA DENGAN TEKNIK PEMISAHAN DATA CARA ACAK	
Abstrak	<p>Telah dilakukan analisis hubungan kuantitatif antara struktur elektronik dan aktivitas (<i>Quantitative electronic Structure-Activity Relationship, QSAR</i>) inhibisi enzim karbonat anhidrase dari seri senyawa benzensulfonamida. Data muatan bersih atom diperoleh dan perhitungan kimia komputasi dengan menggunakan metode AM1 dan PM3 sedangkan aktivitas senyawa diperoleh dari literatur. Dilakukan pemisahan data awal menjadi data <i>fitting</i> dan data uji dilakukan dengan teknik pemisahan cara acak menggunakan fasilitas generator bilangan acak pada pengolah data elektronik <i>Microsoft Excel</i>. Analisis hubungan antara aktivitas inhibisi dan struktur elektronik senyawa dilakukan dengan program SPSS. Hasil analisis QSAR didapatkan masing-masing satu model persamaan sebagai berikut:</p> <p>Metode AM1:</p> $\text{Log K} = 84,571 + 28,203.qC_4 + 49,641.qC_5 + 26,096.qC_6 + 73,300.qO_1$ <p>$n = 29$ $r = 0,882$ $r^2 = 0,778$ $SE = 0,7144$ $F_{hit}/F_{tab} = 7,5810$</p> <p>Metode PM3:</p> $\text{Log K} = -708,313 + 121,610.qC_1 + 41,809.qC_4 + 50,222.qC_5 + 36,753.qC_6 - 732,365.qO_1 - 210,204.qO_2$ <p>$n = 29$ $r = 0,919$ $r^2 = 0,845$ $SE = 0,6243$ $F_{hit}/F_{tab} = 7,8220$</p> <p>Dari hasil penelitian dapat ditunjukkan bahwa analisis QSAR berdasarkan parameter elektronik dengan pemisahan data cara acak memberikan hasil yang akurat.</p>	