


No	6	
Nama	ELFIA SISKI YASA PUTRI	
No Mhs	01/145416/EPA/027	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Pembimbing II	Dr. Karna Wijaya, M.Eng	
Skripsi	APLIKASI PEMISAHAN DATA SECARA ACAK PADA HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR ELEKTRONIK DAN AKTIVITAS SENYAWA INDOLILALKILAMINA	
Abstrak	<p>Telah dilakukan analisis hubungan kuantitatif struktur-aktivitas dan satu seri senyawa indolilalkilamina yang didasarkan pada muatan bersih atom dengan pemisahan data secara acak. Perhitungan muatan bersih atom dan senyawa indolilalkilamina ini dilakukan dengan menggunakan metode semiempirik AM1 dan PM3. Aktivitas biologi senyawa tersebut dinyatakan dalam pKi dan monoamina oksidase.</p> <p>Untuk metode AM1, alternatif model persamaan QSAR terbaik menunjukkan bahwa aktivitas merupakan fungsi linear dari muatan bersih atom C₁, C₂, C₃, C₄, C₇ dan N₁ yang dinyatakan dalam persamaan :</p> $pKi = 171,880 - 718,047.qC_1 - 16,973.qC_2 + 978,802.qC_3 + 1277,985.qC_4 - 287,325.qC_7 - 58,525.qN_1$ <p>n=21; r² = 0,824; SE = 0,985; F_{hitung}/F_{tabel} = 3,842</p> <p>sedangkan untuk metode PM3, aktivitas merupakan fungsi linear dan muatan bersih atom C₃, C₅, C₇, C₈ dan N₁ yang dinyatakan dalam persamaan :</p> $pKi = 29,734 + 144,001.qC_3 - 317,859.qC_5 + 133,912.qC_7 + 310,742.qC_8 + 83,313.qN_1$ <p>n=21; r² = 0,554; SE = 1,515; F_{hitung}/F_{tabel} = 1,286</p>	