


No	3	
Nama	LENSA JUNIARTI MANALU	
No Mhs	98/119461/PA/7181	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Pembimbing II	Dr. Karna Wijaya, M.Eng	
Skripsi	ANALISIS KONFORMASI DAN FARMAKOFOR SENYAWA BUPROPION SEBAGAI SENYAWA ANTINIKOTIN	
Abstrak	<p>Telah dilakukan perbandingan analisis konformasi dan farmakofor terhadap senyawa penekan saraf pusat yaitu bupropion dengan nikotin dan feniletilamina sebagai senyawa pembanding berdasarkan perhitungan kimia komputasi.</p> <p>Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan perhitungan metode semiempirik. Analisis konformasi dilakukan dengan tinjauan rantai samping dan sudut torsi dari setiap senyawa yang dianalisis. Analisis farmakofor meliputi beberapa parameter diantaranya struktur elektronik, momen dwi kutub, EHOMO dan ELUMO serta lipofilitas.</p> <p>Berdasarkan metode AM1 diperoleh nikotin stabil pada $\tau=130^\circ$, feniletilamina pada (1) $\tau_1 = 80^\circ$, $\tau_2 = 180^\circ$, (2) $\tau_1 = 260^\circ$, $\tau_2 = 180^\circ$ dan bupropion pada (1) $\tau_1=160^\circ, \tau_2=280^\circ$, (2) $\tau_1=340^\circ, \tau_2=280^\circ$, (3) $\tau_1=160^\circ, \tau_2=120^\circ$, (4) $\tau_1=340^\circ, \tau_2=120^\circ$. Dari perhitungan metode PM3 diperoleh nikotin stabil pada 130° atau 310°, feniletilamina pada (1) $\tau_1 = 90^\circ$, $\tau_2 = 180^\circ$; (2) $\tau_1 = 270^\circ$, $\tau_2 = 180^\circ$ dan bupropion pada (1) $\tau_1 = 130^\circ$, $\tau_2 = 60^\circ$; (2) $\tau_1 = 310^\circ$, $\tau_2 = 60^\circ$; (3) $\tau_1 = 130^\circ$, $\tau_2 = 240^\circ$; (4) $\tau_1 = 310^\circ$, $\tau_2 = 240^\circ$. Secara umum parameter-parameter tersebut menunjukkan bahwa bupropion memiliki karakter yang mirip dengan nikotin dan feniletilamina, sehingga diduga hal inilah yang mampu menyebabkan bupropion berpotensi sebagai senyawa antinikotin.</p>	