


No	5	
Nama	NUR FITRI FATIMAH	
No Mhs	04/177763/PA/10013	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Pembimbing II	Dr. Ria Armunanto, M.Si	
Skripsi	APLIKASI MLR DAN PCR PADA ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR DAN AKTIVITAS ANTITOKSOPLASMA SENYAWA TURUNAN KUINOLON BERDASARKAN DESKRIPTOR TEORITIK	
Abstrak	<p>Telah dilakukan analisis hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas antitoksoplasma 24 senyawa turunan kuinolon menggunakan deskriptor teoritik berupa efek hidrofobik (log P), sterik (indeks Harary dan indeks Randic), dan elektronik (muatan bersih atom dan selisish energi HOMO-LUMO). Seluruh senyawa dihitung log P dan indeks sterik, kemudian perhitungan struktur elektronik diawali dengan pemodelan molekul untuk mendapatkan struktur paling stabil. Data perhitungan struktur elektronik diperoleh setelah prosedur optimasi geometri dengan metode semiempirik AM1 sedangkan data aktivitas antitoksoplasma (IC₅₀) didapatkan dari literatur. Analisis dilakukan terhadap data awal yang dipisahkan secara acak menjadi data <i>fitting</i> dan data uji dengan metode MLR dan dengan total data untuk metode PCR. Hasil analisis HKSA dari kedua metode adalah sebagai berikut:</p> <p>Metode MLR:</p> $\log 1/IC_{50} = 83,287 - 0,522.\Delta E - 225,7.qC_4 + 7,963.qC_5 + 4,285.qX_8 + 3,107.qX_9 - 109,956.qO_1 + 172,007.qO_2 + 0,025.H$ <p>dengan n = 24; r = 0,942; r² = 0,887; SE = 0,254; F_{hit}/F_{tab} = 5,586</p> <p>Metode PCR:</p> $\log 1/IC_{50} = -3,943 - 0,459.T_1 + 0,521.T_2$ <p>dengan n = 24; r = 0,665; r² = 0,442; SE = 0,478; F_{hit}/F_{tab} = 2,395</p> <p>Dari analisis statistik didapatkan bahwa metode MLR memberikan hasil yang lebih baik daripada metode PCR.</p>	