

No	9	
Nama	Abdul Rozaq	
No Mhs	03/171348/PA/9830	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si	
Pembimbing II	Dr. Jumina	
Skripsi	PENGUNAAN DESKRIPTOR STERIK UNTUK ANALISIS HKSA ANTIMALARIA SENYAWA ANALOG 1,10-FENANTROLIN BERDASARKAN ANALISIS MLR DAN PCR	
Abstrak	<p>Telah dilakukan kajian analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA) antimalaria dari seri senyawa analog 1,10-fenantrolin menggunakan deskriptor sterik sebagai parameter. Kajian ini dilakukan untuk mendapatkan persamaan HKSA yang lebih baik sehingga dapat digunakan untuk mendesain senyawa antimalaria analog 1,10-fenantrolin yang lebih aktif. Data diperoleh dari perhitungan kimia komputasi menggunakan paket program <i>Marvinbeans-4_1_13</i> yang berdasarkan teori graf. Data parameter sterik meliputi analisis topologi dan <i>polar surface area (PSA)</i> dibandingkan terhadap nilai aktivitas antimalaria $\ln(1/IC_{50})$ yang diperoleh dari literatur. Pengolahan statistika dilakukan menggunakan SPSS versi 13.0 dengan metode MLR dan PCR.</p> <p>Dari hasil kajian analisis HKSA terhadap seri senyawa analog 1,10-fenantrolin diperoleh persamaan HKSA yang menghubungkan data indeks topologi molekular dengan aktivitas yang ada. Dengan persamaan untuk metode MLR :</p> $\log (1/IC_{50}) = 15,0364 + (0,0854).AtC + (0,9576).ChA + (0,4022).ArA + (1,6825).HtR + (0,1481).PI + (-3,2174).\chi + (-3,5854).J + (-0,0028).WW + (0,01164).Sz + (-0,4119).WP + (-0,0181) PSA.$ <p>Persamaan memiliki tingkat signifikansi 95% dengan parameter statistik : $n=18$; $r=0,984$; $r^2=0,968$; $SE=0,1668$; $F_{hitung}/F_{tabel}=7,0586$ dan memiliki nilai $PRESS=0,1671$. Hal ini berarti antara aktivitas antimalaria eksperimental dengan aktivitas antimalaria secara teori memiliki nilai penyimpangan yang relatif kecil. Untuk metode PCR diperoleh :</p> $\log (IC_{50}) = -0,0795 + 0,0002. t_1 + 0,0136. t_2 -0,0235. t_3.$ <p>Persamaan memiliki tingkat signifikansi 95% dengan parameter statistik : $n = 18$; $r = 0,7340$; $F_{hitung}/F_{tabel} = 1,7251$ dengan harga $PRESS = 2,4407$. Model HKSA yang dihasilkan dengan metode MLR lebih baik dibandingkan metode PCR.</p>	