


No	4	
Nama	<b>ISNAENI TATIK ROSDIYANA</b>	
No Mhs	H1A099037	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si.	
Pembimbing II	Ponco Iswanto, M.Si	
Instansi	FMIPA, Universitas Jenderal Soedirman, Purwokerto	
Skripsi	<b>HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR ELEKTRONIK DAN AKTIVITAS ANTIKANKER SENYAWA TURUNAN ESTRADIOL HASIL PERHITUNGAN METODE SEMIEMPIRIK PM3</b>	
Abstrak	<p>Telah dilakukan kajian Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA) terhadap aktivitas antikanker satu seri senyawa turunan estradiol dengan tujuan memperoleh persamaan yang mampu digunakan untuk memprediksi nilai aktivitas antikanker senyawa turunan estradiol. Sebagai bahan penelitian adalah data kadar penghambat rata-rata (<math>IC_{50}</math>) eksperimen dari 19 senyawa turunan estradiol yang terbagi menjadi 15 senyawa <i>fitting</i> dan 4 senyawa uji.</p> <p>Analisis HKSA dilakukan berdasarkan perhitungan regresi multilinear terhadap senyawa <i>fitting</i> dengan memplotkan <math>\log (1/IC_{50})</math> sebagai variabel tak bebas dan sebagai variabel bebas adalah muatan bersih atom karbon aromatik, momen dwikutub dan koefisien partisi n-oktanol/air. Harga deskriptor diperoleh dari perhitungan menggunakan metode mekanika kuantum semiempiris PM3. Persamaan HKSA yang dihasilkan adalah:</p> $\text{Log} (1/IC_{50}) = 4,5705 + 4,7934 qC_2 + 37,9810 qC_3 + 152,4690 qC_4 - 113,5838 qC_6 - 0,9619 \mu - 0,4873 \log P$ <p><math>n = 19</math> <math>r = 0,8241</math> <math>SE = 0,3681</math> <math>F_{hitung}/F_{tabel} = 1,4132</math>  <math>PRESS_{eksternal} = 1,6129</math></p>	