


No	6	
Nama	<b>FRANSISKUS WIJAKONGKO</b>	
No Mhs	018114029	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si.	
Pembimbing II	Enade Perdana Istyastono, S.Si.	
Instansi	Fakultas Farmasi Universitas Santa Dharma Yogyakarta	
Skripsi	<b>HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR ELEKTRONIK DAN AKTIVITAS SENYAWA ANALGESIK HASIL PERHITUNGAN METODE SEMIEMPIRIK AM1</b>	
Abstrak	<p>Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (HKSA) modulator reseptor asetilkolin nikotinik <math>\alpha 4\beta 2</math> berdasarkan parameter teoritis hasil perhitungan semi empirik AM1 telah dilakukan. Penelitian ini didasari oleh peralihan fokus pengembangan obat dari reseptor asetilkolin muskarinik menjadi asetilkolin nikotinik yang diduga mempunyai aktivitas biologis yang sama dan munculnya minat pengembangan kimia medisinal menggunakan analisis kimia komputasi. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui hubungan kuantitatif struktur senyawa-senyawa modulator reseptor asetilkolin nikotinik dan aktivitas biologis (<math>IC_{50}</math>) terhadap [<math>^3H</math>]cytisine.</p> <p>Jenis penelitian ini adalah eksperimental kuasi. Data prediktor teoritis diperoleh dari hasil perhitungan semi empirik AM1 menggunakan program komputer <i>HyperChem 6.0</i>. Sembilan belas prediktor digunakan dalam penelitian ini. Data tersebut diolah secara statistik menggunakan analisis regresi multivariat metode <i>backward</i> dengan program <i>SPSS 12.0 for Windows</i>. Tujuh belas model persamaan diperoleh dan dianalisis berdasarkan kriteria statistik untuk memperoleh model persamaan terbaik.</p> <p>Hasil penelitian menunjukkan bahwa model persamaan 9 memenuhi kriteria statistik. Oleh karena itu model persamaan 9 disebut model persamaan terbaik. Model persamaan itu adalah :</p> $\log(1/IC_{50}) = 3,853 + 15,121(qC_2) + 38,399(qN) + 9,730(qC_4) + 1,299(qC_5) + 0,305(\mu) - 0,06228(SA) + 0,03484(V) - 0,721(\log P) + 0,02912(M) - 0,005354(E_b) + 0,00004223(E_c)$ <p style="text-align: center;">( n = 29; m = 11; R = 0,799; SE = 0,693; F = 1,131; PRESS = 8,246 )</p> <p>Model persamaan terbaik tersebut dapat digunakan untuk memprediksikan nilai aktivitas biologis senyawa-senyawa baru modulator reseptor asetilkolin nikotinik yang merupakan turunan piridin.</p>	