


No	7	
Nama	LEONIED YAMATO	
No Mhs	018114045	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si.	
Pembimbing II	Enade Perdana Istyastono, S.Si.	
Instansi	Fakultas Farmasi Universitas Santa Dharma Yogyakarta	
Skripsi	HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR ELEKTRONIK DAN AKTIVITAS SENYAWA ANALGESIK HASIL PERHITUNGAN METODE SEMIEMPIRIK PM3,	
Abstrak	<p>Perkembangan teori reseptor mendorong dilakukannya beberapa penelitian mengenai senyawa modulator reseptor asetilkolin nikotinic yang terkait dengan beberapa penyakit. Salah satu cara yang dapat dilakukan adalah dengan meninjau antara struktur dan aktivitas melalui studi HKSA dalam ilmu kimia medisinal. Senyawa A-85380 dan turunannya diyakini mempunyai aksi modulasi pada reseptor asetilkolin nikotinic $\alpha 4\beta 2$. Penelitian HKSA ini dilakukan untuk mengetahui bagaimana hubungan kuantitatif struktur senyawa modulator reseptor asetilkolin nikotinic dengan aktivitas biologisnya.</p> <p>Penelitian ini bersifat eksperimental kuasi, berupa perhitungan parameter teoritik dengan metode semiempirik PM3 yang kemudian dilanjutkan dengan analisis statistik: menggunakan metode regresi multivariat. Data parameter teoritik: dihitung dengan paket program <i>HyperChem Pro ver. 6.0</i> sebagai variabel bebas dan konsentrasi yang menghambat ikatan <i>eHJcytisine</i> pada reseptor $\alpha 4\beta 2$ ($\log IIC_{50}$) sebagai variabel tergantung. Perhitungan statistik dilakukan dengan paket program <i>SPSS 13.0 for Windows</i>. Parameter-parameter statistik hasil perhitungan digunakan untuk memilih model persamaan "terbaik" yang dapat menggambarkan dengan tepat hubungan sifat fisika kimia senyawa modulator dan aktivitasnya.</p> <p>Hubungan kuantitatif struktur-aktivitas senyawa modulator reseptor asetilkolin nikotinic $\alpha 4\beta 2$ (<i>nAChRs</i>) dapat digambarkan dengan model persamaan "terbaik" yang telah dianalisis secara statistik, yaitu</p> $\log \frac{1}{IC_{50}} = -22,452 + 3,809qC_1 - 45,351qC_2 - 61,125qN - 7,656qC_4 + 3,012qC_5 - 0,214\mu + 2,083E_{LUMO} - 2,840E_{HOMO} - 0,093SA + 0,101E_h - 0,532\log P + 0,746\alpha + 0,063M$ <p>($n = 29$, $m = 13$, $R = 0,828$, $R^2 = 0,686$, $SE = 0,688$, $F_{hitung}/F_{tabel} = 1,028$, dan $PRESS = 7,095$)</p> <p>Model persamaan tersebut dapat digunakan untuk memprediksi aktivitas senyawa baru yang mempunyai aktivitas modulasi reseptor asetilkolin nikotinic yang lebih baik.</p>	