


No	8	
Nama	<b>DONO PANGGARJITO</b>	
No Mhs	018114046	
Pembimbing I	Drs. Iqmal Tahir, M.Si.	
Pembimbing II	Enade Perdana Istyastono, S.Si.	
Instansi	Fakultas Farmasi Universitas Santa Dharma Yogyakarta	
Skripsi	<p align="center"><b>HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR-AKTIVITAS MODULATOR RESEPTOR ASETILKOLIN NIKOTINIK <math>\alpha 4\beta 2</math> MENGGUNAKAN PREDIKTOR TEORITIK HASIL PERHITUNGAN MNDO</b></p>	
Abstrak	<p>Munculnya penelitian ini didasari oleh beralihnya fokus pengembangan obat dari reseptor asetilkolin muskarinik menjadi asetilkolin nikotinik yang diduga mempunyai aktivitas yang sama. Beberapa senyawa obat telah terbukti mempunyai aksi modulasi reseptor asetilkolin nikotinik, misalnya A-85380 dan turunan pridin lain. Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui hubungan secara kuantitatif antara struktur senyawa modulator reseptor asetilkolin nikotinik dan aktivitas biologis <math>IC_{50}</math> (konsentrasi aktivitas penghambatan 50% populasi).</p> <p>Penelitian ini bersifat kuantitatif eksperimental quasi, dilakukan dengan menganalisis statistik prediktor teoritik hasil perhitungan metode MNDO dengan metode regresi multivariat. Data prediktor teoritik didapat dari perhitungan menggunakan paket program <i>HyperChem 6.0</i>, dan perhitungan statistik dilakukan dengan menggunakan paket program <i>SPSS 11.0 for Windows</i>. Analisis dilakukan berdasarkan persyaratan statistik dari beberapa model persamaan sehingga didapatkan satu model persamaan terbaik yang secara signifikan mampu menggambarkan hubungan sifat fisikakimia senyawa modulator dan aktivitasnya.</p> <p>Hasil penelitian menunjukkan bahwa model persamaan terbaik HKSA senyawa modulator reseptor asetilkolin nikotinik <math>\alpha 4\beta 2</math> adalah sebagai berikut:</p> $\log\left(\frac{1}{IC_{50}}\right) = 15,010 - 6,169(qC_1) + 45,884(qN) + 5,686(qC_4) - 1,802(qC_5) - 0,397(\mu) + 2,449(E_{LUMO}) - 9,133 \cdot 10^{-2}(SA) + 6,129 \cdot 10^{-2}(V) - 0,313(\log p) - 0,108(MR) + 1,223 \cdot 10^{-2}(M)$ <p>(n = 29; m = 11; R = 0,909; R<sup>2</sup> = 0,827; SE = 0,480; rasio F = 3,053)</p> <p>Hasil model persamaan dapat digunakan untuk memprediksi aktivitas senyawa baru untuk mendapatkan aktivitas modulasi reseptor yang lebih baik, oleh karena itu masih perlu dilakukan penelitian lebih lanjut untuk mendapatkan usulan senyawa baru untuk sintesis.</p>	