


No	2	
Nama	Ajidarma Widiatmoko	
No Mhs	16699/I-4/1256/01	
Pembimbing I	Dr. Harno Dwi Pranowo, M.Si	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si.	
Skripsi	<p style="text-align: center;">ANALISIS HKSA TURUNAN KURKUMIN SEBAGAI PENGHAMBAT AKTIVITAS ENZIMATIK SITOKROM P450 PADA REAKSI ETHOXYRESORUFIN O-DEALKYLATION (EROD) DENGAN DESKRIPTOR TEORITIS</p>	
Abstrak	<p>Studi hubungan kuantitatif struktur-aktivitas (HKSA) atau <i>Quantitative Structure-Activity Relationships</i> (QSAR) telah dilakukan terhadap 29 senyawa analog kurkumin pada aktivitas penghambatan EROD yang dinyatakan dengan konsentrasi yang memberikan penghambatan 50% terhadap reaksi <i>Ethoxyresorufin O-Dealkylation</i> (BROD IC₅₀) dengan menggunakan deskriptor elektronik dan non elektronik. Deskriptor elektronik diperoleh dari perhitungan semiempiris AM1 dan PM3, sementara deskriptor non elektronis diperoleh dari perhitungan parameterparameter dengan menggunakan program HCQSAR dan <i>Toolkit for Estimating Physicochemical Properties of Organic Compounds</i>. Model persamaan QSAR terbaik ditentukan oleh parameter statistik hasil analisis regresi multilinear dan hasil pengujian validitas model persamaan dengan menggunakan metode validasi silang <i>leave-one-out</i>. Model persamaan QSAR terbaik selanjutnya dipergunakan sebagai dasar pemodelan senyawa baru analog kurkurnin beserta aktivitas penghambatan ERODnya.</p> <p>Hasil penelitian menunjukkan bahwa deskriptor yang diperoleh dengan menggunakan perhitungan semiempiris AM1 menghasilkan model persamaan QSAR yang secara statistik lebih baik dibandingkan dengan model persamaan QSAR menggunakan metode semiempiris PM3. Model persamaan QSAR terbaik melibatkan kombinasi antara deskriptor elektronik dan deskriptor non elektronik. Model persamaan QSAR terbaik dinyatakan sebagai berikut :</p> $\log 1/IC_{50} = (25,023 \pm 7,654) + (24,802 \pm 5,225)qC_{10} + (213,812 \pm 34,776)qC_{13} - (13,823 \pm 1,808)qC_{17} - (228,620 \pm 38,901)qO_1 - (266,743 \pm 43,505)qO_2 - (0,0335 \pm 0,005)MR$ <p>r = 0,933; SE = 0,555; F/F_{tabel}=9,612; PRESS = 6,934</p>	