


No	3	
Nama	Yuliana	
No Mhs	15259/I-4/1206/00	
Pembimbing I	Dr. Harno Dwi Pranowo, M.Si	
Pembimbing II	Dr. Jumina	
Pembimbing II	Drs. Iqmal Tahir, M.Si.	
Tesis	ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR ELEKTRONIK DAN AKTIVITAS ANTIMUTAGEN SENYAWA TURUNAN BENZALASETON MENGGUNAKAN PENDEKATAN <i>PRINCIPAL COMPONENT REGRESSION</i>	
Abstrak	<p>Telah dikaji Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) pada suatu seri senyawa benzalaseton menggunakan data muatan bersih atom hasil perhitungan semi empirik PM3 dengan analisis <i>Principal Component Regression</i> (PCR). Pengkajian dilakukan terhadap data aktivitas antimutagen senyawa benzalaseton (dinyatakan dalam $\log 1/IC_{50}$), dan dipelajari sebagai fungsi linear dari variabel laten (T_x) hasil transformasi data muatan bersih atom menggunakan <i>Principal Component Analysis</i> (PCA). Persamaan HKSA ditentukan berdasarkan kontribusi komponen yang terpilih dan selanjutnya dianalisis PCR.</p> <p style="text-align: center;">Model persamaan HKSA diperoleh dalam bentuk :</p> $\log 1/IC_{50} = 6,555 + (2,177).T_1 + (2,284).T_2 + (1,933).T_3$ <p>Persamaan signifikan pada tingkat kepercayaan 95% dengan parameter statistik : $n = 28$ $r = 0,766$ $SE = 0,245$ $F_{hitung}/F_{tabel} = 3,780$. Hasil analisis terhadap persamaan memberikan nilai PRESS= 0,002, yang berarti bahwa antara data aktivitas antimutagen eksperimen dengan data aktivitas antimutagen teoritis terdapat penyimpangan yang relatif kecil.</p> <p>Dari persamaan HKSA terbaik yang diperoleh di atas telah didesain molekul baru turunan senyawa benzalaseton. Molekul baru tersebut yaitu senyawa 29, 30, 31, 32, 33, 35, 36, 37, 38, 40, 41, 42, 44, 47, 48, 49 dan 50 secara teoritis mempunyai aktivitas antimutagen yang tinggi.</p>	