

## **ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR AKTIVITAS SENYAWA TURUNAN ESTER CARABROL SEBAGAI ANTIJAMUR**

I Wayan Krisna Adijaya  
16/394132/PA/17223

### **INTISARI**

Analisis hubungan kuantitatif struktur aktivitas (HKSA) senyawa turunan ester carabrol sebagai antijamur telah dilakukan terhadap 36 senyawa turunan ester carabrol. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan persamaan HKSA senyawa turunan ester carabrol dan mendesain senyawa baru dengan nilai aktivitas antijamur prediksi yang lebih tinggi berdasarkan persamaan HKSA yang telah diperoleh.

Penentuan metode komputasi dan himpunan basis setnya dilakukan untuk menemukan metode terbaik yang digunakan untuk menghitung deskriptor elektronik dan molekuler dari 36 senyawa turunan ester carabrol. Persamaan HKSA dipilih melalui metode regresi multilinier dan digunakan untuk mendesain senyawa usulan ester carabrol.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa persamaan HKSA terbaik menggunakan metode DFT/B3LYP dengan himpunan basis 6-311G yaitu  $pIC_{50} = -40,47 + (-18,933 \times LUMO) + (2,681 \times qC20) + (11,152 \times qO4) + (-90,647 \times qO1) + (-0,108 \times LogP)$  dengan parameter statistika  $r^2 = 0,783$ ;  $SEE = 0,053$ ;  $F_{hitung}/F_{tabel} = 5,008$  dan  $PRESS = 0,461$ . Persamaan ini digunakan untuk mendesain senyawa usulan baru ester carabrol dengan aktivitas antijamur yang lebih tinggi yaitu senyawa (karabril 4-nitrobenzoat) dengan aktivitas antijamur prediksi sebesar 1,16  $\mu\text{g/mL}$ .

Kata Kunci: ester carabrol, HKSA, antijamur

***ANALYSIS OF QUANTITATIVE RELATIONSHIPS ON THE STRUCTURE  
OF ACTIVITY OF CARABROL ESTER DERIVATIVE COMPOUNDS AS  
ANTIFUNGAL***

I Wayan Krisna Adijaya  
16/394132/PA/17223

**ABSTRACT**

Analysis of the quantitative relationship structure of the activity of carabrol ester derivatives as antifungals was carried out on 36 ester carabrol derivatives. This research aimed to determine the QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship) equation for carabrol ester derivatives and to design a new compound with a higher predicted antifungal activity value based on the QSAR equation that has been obtained.

Computational method validation and its basis set were carried out to find the best method used to calculate the electronic and molecular descriptors of 36 ester carabrol derivatives. The QSAR equation was selected through a multilinear regression method and used to design the proposed ester carabrol compound.

The results showed that the best HKSA equation used the DFT/B3LYP method with a base set of 6-311G namely  $pIC_{50} = -40.47 + (-18.933 \times LUMO) + (2.681 \times qC20) + (11.152 \times qO4) + (-9.47 \times qO1) + (-0.108 \times LogP)$  with statistical parameters  $r^2 = 0.783$ ;  $SEE = 0.053$ ,  $F_{count}/F_{table} = 5.008$  and  $PRESS = 0.461$ , This equation was used to design a new proposed compound for carabrol ester with higher antifungal activity, namely a compound (Carabryl 4-nitrobenzoate) with a predicted antifungal activity of 1.16 µg/mL.

Keyword : carabrol ester, QSAR, antifungal