

ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR AKTIVITAS (HKSA) MODIFIKASI SENYAWA TURUNAN 4-KUINOLINIL HIDRAZON SEBAGAI AGEN ANTI MALARIA

Alfhine Morries
17/414616/PA/18116

INTISARI

Analisis hubungan struktur aktivitas (HKSA) terhadap 22 senyawa turunan 4-kuinolinil hidrazon sebagai senyawa antimalaria yang dilakukan menggunakan deskriptor elektronik muatan atom bersih (q), momen dipol (μ), E_{LUMO} , E_{HOMO} , dan polarisabilitas (P). Penelitian ini bertujuan untuk menentukan persamaan HKSA menggunakan metode regresi MLR serta mendesain senyawa baru yang memiliki aktivitas antimalaria yang lebih tinggi berdasarkan persamaan HKSA yang diperoleh.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa persamaan HKSA terbaik yang diperoleh melalui metode MLR yaitu $\text{Log}(1/IC_{50}) = 68,311 + (39,991 \times qC2) + (304,085 \times qC5) + (-10,494 \times qC6) + (-45,536 \times qN1) + (39,819 \times qN2) + (-0,097 \times \mu) + (1,919 \times E_{HOMO}) + (-0,012 \times MW) + (-0,001 \times SA)$.

Desain senyawa baru yang dilakukan berdasarkan persamaan HKSA terbaik, melalui metode MLR yaitu senyawa D(6-kloro-4-kuinolinimetoksihidrazon).

Kata kunci: AM1, antimalaria, HKSA, kuinolinil hidrazon, MLR.

***QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP (QSAR)
ANALYSIS MODIFICATION OF 4-QUINOLINYL HYDRAZONE
DERIVATIVE COMPOUND AS ANTIMALARIA AGENT***

Alfhine Morries
17/414616/PA/18116

ABSTRACT

Analysis of Quantitatif Structure Activity Relationship (QSAR) of 22 4-quinolinyl hydrazone derivatives has been carried out using elektronik descriptors of net atomic charge (q), dipole moment (μ), E_{LUMO} , E_{HOMO} , and polarizability (P). This study aims to determine the QSAR equation using the MLR regression method and to design new compounds that have higher antimalarial activity based on the QSAR equation that has been obtained.

The results showed that the best QSAR equation was obtained using the MLR method, namely $\text{Log}(1/IC_{50}) = 68,311 + (39,991 \times qC2) + (304,085 \times qC5) + (-10,494 \times qC6) + (-45,536 \times qN1) + (39,819 \times qN2) + (-0,097 \times \mu) + (1,919 \times E_{HOMO}) + (-0,012 \times MW) + (-0,001 \times SA)$.

The design of the new compound is based on the best QSAR equation, through the MLR method is D compound (6-chloro-4-quinolindimetoxyhydrazone).

Keywords: AM1, antimalaria, MLR, QSAR, quinolinyl hydrazone.