

## KAJIAN HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR DAN AKTIVITAS (HKSA) ANTIDIABETES ANALOG KURKUMIN $\beta$ -KETOAMIDA MENGUNAKAN DESKRIPTOR HASIL PERHITUNGAN METODE AB INITIO HARTREE-FOCK

Kaharani Annindya Nissa  
17/412681/PA/18000

### INTISARI

Kajian Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) senyawa antidiabetes dari senyawa analog kurkumin  $\beta$ -ketoamida telah dilakukan dengan menggunakan deskriptor elektronik dan molekuler. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh senyawa analog kurkumin  $\beta$ -ketoamida baru yang memiliki aktivitas lebih tinggi dari senyawa yang telah diketahui. Optimasi struktur senyawa kurkumin  $\beta$ -ketoamida dilakukan menggunakan metode *ab initio* Hartree-Fock (HF) dengan himpunan basis 6-31G untuk memodelkan struktur senyawa analog kurkumin  $\beta$ -ketoamida. Model HKSA diperoleh dari analisis regresi multiliner (MLR) dengan metode *backward*.

Persamaan HKSA terbaik untuk aktivitas antidiabetes adalah:

$$\text{Log IC}_{50} = -6,871 + (0,021 \times \text{Momen Dipol}) + (3,365 \times \text{HOMO}) + (-6,436 \times \text{LUMO}) + (-0,007 \times \text{Volume}) + (0,005 \times \text{Luas Permukaan}) + (-1,101 \times q_{C10}) + (-20,286 \times q_{O13}) + (2,097 \times q_{C5})$$

Desain senyawa analog kurkumin  $\beta$ -ketoamida baru dengan prediksi aktivitas terbaik adalah (E)-2-((E-4-nitrobenziliden)-5-(4-nitrofenil)-1-piperidinil)pent-4-en-1,3-dion dengan nilai  $\text{IC}_{50}$  prediksi 1,453  $\mu\text{g/mL}$ .

Kata kunci: *ab initio*, antidiabetes, HKSA, kurkumin  $\beta$ -ketoamida

**STUDY ON QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY  
RELATIONSHIPS (QSAR) ANTIDIABETIC OF  $\beta$ -KETOAMIDE  
CURCUMIN ANALOGUES USING DESCRIPTORS CALCULATED BY  
AB INITIO HARTREE-FOCK METHOD**

Kaharani Annindya Nissa  
17/412681/PA/18000

**ABSTRACT**

Quantitative Structure and Activity Relationship (HKSA) studies of antidiabetic compounds from curcumin  $\beta$ -ketoamide analogues have been carried out using electronic and molecular descriptors. This research aims to obtain a new curcumin  $\beta$ -ketoamide analogue compound which has higher activity than known compounds. Optimization of the structure of the curcumin  $\beta$ -ketoamide compound was carried out using the ab initio Hartree-Fock (HF) method with the 6-31G basis set to model the structure of the curcumin  $\beta$ -ketoamide analogue compound. The HKSA model is obtained from multilinear regression analysis (MLR) using the backward method.

The best HKSA equation for antidiabetic activity is:

$$\text{Log IC}_{50} = -6.871 + (0.021 \times \text{Dipole Moment}) + (3.365 \times \text{HOMO}) + (-6.436 \times \text{LUMO}) + (-0.007 \times \text{Volume}) + (0.005 \times \text{Surface Area}) + (-1.101 \times \text{qC10}) + (-20.286 \times \text{qO13}) + (2.097 \times \text{qC5})$$

Design of a new curcumin  $\beta$ -ketoamide analogue compound with the best predicted activity is (E)-2((E-4-nitrobenzylidene)-5-(4-nitrophenyl)-1-piperidin-1-yl)pent-4-ene-1,3-dione with a predicted  $\text{IC}_{50}$  value of 1,453  $\mu\text{g/mL}$ .

**Keywords :** ab initio, antidiabetic, curcumin  $\beta$ -ketoamide, QSAR