

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
DAFTAR ISTILAH, SINGKATAN DAN LAMBANG	x
INTISARI	xi
BAB I ABSTRACT	xii
PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Flavon	5
II.1.2 Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA)	8
II.1.3 Analisis kemometri untuk HKSA	12
II.1.4 Metode kimia komputasi	16
II.1.5 Metode perhitungan muatan bersih atom	17
II.1.5.1 Analisis populasi Mulliken	17
II.1.5.2 Metode pemerataan elektronegativitas (EEM)	18
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	24
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	24
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	25
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	25
II.2.4 Rancangan penelitian	26
BAB III METODE PENELITIAN	27
III.1 Bahan	27
III.2 Peralatan	28
III.3 Prosedur Penelitian	28
III.3.1 Pemilihan metode komputasi	28
III.3.2 Rekapitulasi parameter muatan atom	29
III.3.3 Penyesuaian model HKSA	29
III.3.4 Desain senyawa baru	30
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	31

IV.1 Pemilihan Metode	31
IV.2 Perhitungan Deskriptor	34
IV.3 Penyusunan Persamaan HKSA	37
IV.3.1 Persamaan HKSA dari AM1-AMP	38
IV.3.2 Persamaan HKSA dari AM1-EEM	42
IV.3.3 Persamaan HKSA dari ChemSPider-EEM	44
IV.3.4 Evaluasi perbandingan persamaan HKSA	47
IV.3.5 Desain senyawa baru	48
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	50
V.1 Kesimpulan	50
V.2 Saran	51
DAFTAR PUSTAKA	52

DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1	Kerangka dasar flavonoid dan flavon	6
Gambar II.2	Struktur flavon dan 14 senyawa turunan flavon	6
Gambar IV.1	Grafik perhitungan deskriptor pada semua metode	33
Gambar IV.2	Korelasi aktivitas toksisitas prediksi dengan AM1 populasi Mulliken dan eksperimen senyawa turunan flavon	41
Gambar IV.3	Korelasi aktivitas toksisitas prediksi dengan EEM hasil optimasi AM1 dan eksperimen senyawa turunan flavon	44
Gambar IV.4	Korelasi aktivitas toksisitas prediksi dengan EEM hasil optimasi ChemSpider dan eksperimen senyawa turunan flavon	47
Gambar IV.5	Atom-atom yang mempengaruhi toksisitas senyawa turunan flavon	47
Gambar IV.6	Struktur senyawa 7,3' dihidroksi, 5,5' dikloroflavon	49

DAFTAR TABEL

Tabel II.1	Deskriptor-deskriptor pada analisis QSAR	11
Tabel II.2	Teknik-teknik statistik atau kemometrik	13
Tabel III.1	Data toksisitas berupa LD ₅₀ (gram/mL) senyawa flavon dan 14 turunan flavon	27
Tabel IV.1	Hasil perhitungan muatan bersih atom dengan berbagai metode	32
Tabel IV.2	Hasil validasi semua metode yang digunakan	34
Tabel IV.3	Hasil perhitungan muatan bersih atom senyawa flavon dan 14 turunannya dengan metode AM1-APM	35
Tabel IV.4	Hasil perhitungan muatan bersih atom senyawa flavon dan 14 turunannya dengan metode AM1-EEM	36
Tabel IV.5	Hasil perhitungan muatan bersih atom senyawa flavon dan 14 turunannya dengan metode ChemSpider-EEM	37
Tabel IV.6	Model-model persamaan QSAR dengan metode AM1-APM	39
Tabel IV.7	Model-model persamaan QSAR dengan metode AM1-EEM	42
Tabel IV.8	Model-model persamaan QSAR dengan metode ChemSpider-EEM	45
Tabel IV.9	Senyawa-senyawa baru turunan flavon yang memiliki nilai Toksisitas yang berbeda	49

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Hasil muatan bersih atom senyawa flavon berupa .log file dengan menggunakan metode AM1	55
Lampiran 2 Hasil muatan bersih atom senyawa flavon dengan menggunakan metode EEM	56
Lampiran 3 Senyawa flavon dan turunan flavon yang telah dioptimasi dengan metode AM1	57
Lampiran 4 Input data untuk analisi regresi multilinear	60
Lampiran 4 Hasil analisis regresi multilinear metode backward	61
Lampiran 5 Kode SMILES yang digunakan pada ChemSpider	67

DAFTAR ISTILAH, SINGKATAN DAN LAMBANG

AM1	: Austin Model 1
AMP	: Analisis Populasi Mulliken
EEM	: <i>Electronegativity Equalization Method</i>
GB	: GigaByte
GHz	: GigaHertz
HF	: Hartre-Fock
HKSA	: Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas
LD ₅₀	: <i>Lethal Dose</i>
LFER	: <i>Linier Free Energy Relationship</i>
MLR	: <i>Multiple Linear Regression</i>
PM3	: <i>Parameterized Model 3</i>
PPM	: <i>Parts per Million</i>
PRESS	: <i>Predicted Residual Sum of Square</i>
q	: Muatan atom
QSAR	: <i>Quantitative Structure – Activity Relationship</i>
r	: Koefisien korelasi
r ²	: Koefisien Determinasi
RAM	: <i>Random Access Memory</i>
RMS	: <i>Root Mean Square</i>
SEE	: <i>Standard Error of the Estimate</i>
Var	: variabel