

**PENGUNAAN MUATAN BERSIH ATOM HASIL PERHITUNGAN  
METODE PEMERATAAN ELEKTRONEGATIVITAS SEBAGAI  
DESKRIPTOR PADA ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF  
STRUKTUR-AKTIVITAS SENYAWA TURUNAN FLAVON**

Elysia Veriniasari

14/368976/PA/16329

**INTISARI**

Penggunaan metode pemerataan elektronegativitas (EEM) untuk menghitung muatan bersih atom sebagai deskriptor elektronik telah dilakukan untuk analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA). Penelitian ini dilakukan untuk menentukan persamaan hubungan kuantitatif antara struktur dengan toksisitas dari senyawa turunan Flavon dengan menggunakan deksriptor elektronik.

Analisis HKSA dilakukan untuk mendapat informasi deskriptor yang mempengaruhi toksisitas pada senyawa turunan flavon. Parameter yang digunakan yaitu muatan atom dari senyawa flavon beserta 14 turunnya. Parameter tersebut diperoleh dari perhitungan muatan atom dengan AM1 analisis populasi Mulliken, AM1 dengan EEM dan ChemSpider dengan EEM. Ketiga metode ini dibandingkan dan dipilih persamaan HKSA yang terbaik. Persamaan HKSA yang terbaik diperoleh dengan cara mengolah data eksperimen dari toksisitas senyawa flavon dan turunnya menggunakan metode analisis regresi multilinear (MLR).

Persamaan HKSA terbaik yang diperoleh yaitu dengan EEM hasil optimasi AM1 yaitu:  $\text{Log1/LD}_{50} = -5,498 \text{ qC3} + 2,896 \text{ qC4} - 11,868 \text{ qC6} + 173,789 \text{ qO7} + 18,121 \text{ qC8} - 34,256 \text{ qC12} - 8,342 \text{ qC13} - 1,943 \text{ qC15} - 16,938 \text{ qO17} + 99,491$  dengan  $n = 15$   $r = 0,990$   $r^2 = 0,980$   $F_{\text{hit}}/F_{\text{tab}} = 5,723$   $\text{PRESS} = 0,04$ . Sehingga dapat disimpulkan bahwa EEM dapat digunakan sebagai perhitungan deskriptor untuk analisis HKSA. Dari persamaan HKSA yang terbaik didapatkan senyawa turunan flavon baru yang memiliki toksisitas lebih rendah yaitu 7,3'-dihidroksi, 5,5'-dikloroflavon dengan nilai  $\text{LD}_{50}$  sebesar 121,1 ppm.

Kata kunci : AM1, Metode pemerataan elektronegativitas, flavon, HKSA, regresi multilinear

## THE USE OF ATOMIC NET CHARGES RESULTED BY CALCULATION USING ELECTRONEGATIVITY EQUALIZATION METHOD AS DESCRIPTORS ON QSAR ANALYSIS OF FLAVONE DERIVATIVE COMPOUND

Elysia Veriniasari

14/368976/PA/16329

### ABSTRACT

The use of electronegativity equalization method (EEM) to calculate atomic net charges as electronic descriptor has been done to QSAR analysis. This research was conducted to determine the QSAR equation by using electronic descriptor. The QSAR analysis was performed to obtain descriptor information that influenced the toxicity of flavone compound.

The parameters used were the atomic charges of the flavone and 14 derivative compound. The parameters were obtained from the calculation of atomic charge with the AM1 Mulliken population analysis, AM1 with EEM and ChemSpider with EEM. These three methods compared and selected the best QSAR equations. The best QSAR equation was obtained by processing experimental data and descending using multilinear regression method (MLR).

The best QSAR equation by used AM1-EEM was:  $\text{Log1/LD}_{50} = -5,498 \text{ qC3} + 2,896 \text{ qC4} - 11,868 \text{ qC6} + 173,789 \text{ qO7} + 18,121 \text{ qC8} - 34,256 \text{ qC12} - 8,342 \text{ qC13} + 1,943 \text{ qC15} - 16,938 \text{ qO17} + 99,491$   $n = 15$   $r = 0,990$   $r^2 = 0,980$   $F_{\text{hit}}/F_{\text{tab}} = 5,723$   $\text{PRESS} = 0,049$ . So it can be concluded that EEM can be used as a calculation of descriptor for QSAR analysis. Based on the best QSAR equation, a new compound has been designed as 7,3' dihydroxy, 5,5' dichloroflavone with predicted  $\text{LD}_{50}$  was 121,1 ppm

Keywords : AM1, Electronegativity equalization method, flavon, QSAR, multilinear regression