

ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR-AKTIVITAS (HKSA) SENYAWA INHIBITOR *PHOSPHOGLYCERATE MUTASE 1* (PGAM1) TURUNAN XANTHONE UNTUK MENGUJI PENGGUNAAN DESKRIPTOR MUATAN BERSIH ATOM HASIL PERHITUNGAN METODE PENYETARAAN ELEKTRONEGATIVITAS

Aristi Amalia Royani
14/369004/PA/16334

INTISARI

Penggunaan deskriptor muatan bersih atom hasil perhitungan metode penyetaraan elektronegativitas atau *Electronegativity Equalization Method* (EEM) telah dilakukan pada analisis hubungan kuantitatif struktur-aktivitas (HKSA) senyawa inhibitor PGAM1 turunan xanthone. Penelitian ini bertujuan untuk menguji penggunaan EEM dalam melakukan perhitungan deskriptor pada metode HKSA melalui analisis regresi multilinier (MLR) dan regresi komponen utama (PCR). Optimasi molekul dilakukan dengan menggunakan metode semiempirik MNDO untuk memodelkan struktur senyawa turunan xanthone. Perhitungan deskriptor muatan bersih atom dilakukan dengan metode analisis populasi Mulliken (APM) dan EEM terhadap struktur senyawa hasil optimasi MNDO. Model HKSA didapatkan dari analisis MLR dan PCR dengan menggunakan metode *backward*.

Berdasarkan hasil penelitian ini, EEM merupakan metode perhitungan deskriptor muatan bersih atom yang memberikan hasil kurang akurat namun memiliki waktu yang lebih cepat dibandingkan dengan APM hasil optimasi metode semiempirik CNDO, MNDO, AM1, dan PM3. HKSA menggunakan metode MLR dengan perhitungan deskriptor muatan bersih atom dengan metode APM menunjukkan hasil yang terbaik pada 19 senyawa inhibitor PGAM1 turunan xanthone, ditunjukkan dengan nilai koefisien korelasi sebesar 0,96 dan nilai PRESS, yaitu 0,12.

Kata kunci: HKSA, inhibitor PGAM1, APM, EEM, regresi multilinier, regresi komponen utama

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP ANALYSIS OF INHIBITOR PHOSPHOGLYCERATE MUTASE 1 (PGAM1) XANTHONE DERIVATIVE COMPOUNDS FOR TESTING APPLICATION OF ATOMIC CHARGE DESCRIPTORS CALCULATED BY ELECTRONEGATIVITY EQUALIZATION METHOD

Aristi Amalia Royani
14/369004/PA/16334

ABSTRACT

Application of atomic charge descriptors calculated by electronegativity equalization method (EEM) had been conducted on QSAR analysis of anticyanobacteria maleimide derivative compounds. This research aimed to examine application of EEM in descriptor calculations performed on the QSAR method using multiple linear regression (MLR) analysis for the new design of anticyanobacteria compounds. Molecular optimization was conducted using MNDO semiempirical method applied to the maleimide derivative compounds. The atomic charge descriptor calculated by Mulliken population analysis method and EEM using compounds structure optimized by MNDO. The QSAR model were derived from MLR analysis by using backward method.

Based on the results of this study, EEM was an atomic net charge descriptor calculation method that gives less accurate results but had a faster time compared to APM resulting from semiempirical optimization methods CNDO, MNDO, AM1, and PM3. HKSA using the MLR method by calculating the atomic net charge descriptor with the APM method showed the best results on 19 PGAM1 inhibitor xanthone derivative compounds, indicated by the correlation coefficient value of 0.96 and PRESS score of 0.12.

Keywords: HKSA, PGAM1 inhibitor, Mulliken population analysis, EEM, multilinear regression, principal component regression