

INTISARI

STUDI QSAR DAN DESAIN SENYAWA TURUNAN ANTRAPIRAZOLON BARU SEBAGAI AGEN ANTIKANKER

Oleh:
Moh Syaifudin
16/403627/PPA/05144

Analisis QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationship*) senyawa antikanker prostat dari senyawa analog antrapirazon telah dilakukan dengan menggunakan deskriptor elektronik dan molekuler. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh desain turunan senyawa analog antrapirazon baru yang memiliki aktivitas lebih tinggi dari senyawa yang telah ada sebelumnya. Optimasi molekul dilakukan dengan menggunakan metode DFT B3LYP 6-31G untuk memodelkan struktur senyawa analog antrapirazon. Deskriptor yang mempengaruhi IC_{50} adalah muatan C13, C4, C5, C6, C10, C13, N15, N16 dan PSA (*Polar Surface Area*). Konsentrasi hambat setengah maksimal (IC_{50}) adalah ukuran potensi suatu zat dalam menghambat fungsi biologis atau biokimia tertentu. Model QSAR didapatkan dari analisis multilinear (MLR) dengan menggunakan metode *backward*. Persamaan QSAR terbaik untuk aktivitas antikanker prostat adalah:
$$\text{LogIC}_{50} = -99,896 + (23,653 \times qC13) + (51,954 \times qC4) + (39,198 \times C5) + (6,668 \times C6) + (-45,035 \times C10) + (-436,566 \times C13) + (-44,796 \times N15) + (-41,389 \times N16) + (-0,009 \times \text{PSA})$$

Desain senyawa yang terbaik adalah senyawa 3A ((2,6-dihydrodibenzo[cd,g]indazol-7-yl)amino)methanol.

Kata kunci: QSAR, DFT, antikanker, antrapirazon

ABSTRACT

QSAR STUDY AND DESIGN OF NEW ANTHRAPHYRAZOLONE DERIVATIVES AS ANTICANCER AGENTS

By:

Moh Syaifudin

16/403627/PPA/05144

QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) analysis of anthrapyrazolone analogs as prostate anticancer agents has been conducted using electronic and molecular descriptors. This research aimed to obtain new design anthrapyrazolone analogs that had higher activity than the compounds that have been known before. Molecules optimization has been performed using the DFT B3LYP 6-31G method for modeling the structure of the anthrapyrazolone analogues. Descriptors that affect IC_{50} are C13, C4, C5, C6, C10, C13, N15, N15, and PSA (Polar Surface Area) loads. The half maximal inhibitory concentration (IC_{50}) is a measure of the potency of a substance in inhibiting a specific biological or biochemical function. QSAR models were derived from multiple linear regression (MLR) analysis by using a backward method. The best QSAR equation for prostate anticancer activity is:

$$\text{LogIC}_{50} = -99,896 + (23,653 \times C13) + (51,954 \times C4) + (39,198 \times C5) + (6,668 \times C6) + (-45,035 \times C10) + (-436,566 \times C13) + (-44,796 \times N15) + (-41,389 \times N16) + (-0,009 \times \text{PSA})$$

The new designs of curcumin analogs with the best activity prediction is compound number 3A ((2,6-dihydrodibenzo[cd,g]indazol-7-yl)amino)methanol.

Keyword: QSAR, DFT, anticancer, anthrapirazonone