

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
LEMBAR PENGESAHAN .....	ii
LEMBAR PERNYATAAN.....	iii
PRAKATA.....	iv
DAFTAR ISI .....	v
DAFTAR GAMBAR .....	vii
DAFTAR TABEL .....	viii
DAFTAR LAMPIRAN.....	ix
INTISARI.....	x
ABSTRACT .....	xi
<b>BAB I. PENDAHULUAN</b>	
I.1 Latar Belakang.....	1
I.2 Tujuan .....	2
<b>BAB II. TINJAUAN PUSTAKA</b>	
II.1 Penyakit Tuberkulosis.....	3
II.2 Obat Tuberkulosis .....	4
II.3 Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas .....	5
II.3.1 Persamaan Free-Wilson .....	5
II.3.2 Persamaan Hansch.....	6
II.3.3 Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas 3D (HKSA 3D).....	6
II.4 Deskriptor dalam HKSA.....	6
II.4.1 Deskriptor Hidrofobik.....	7
II.4.2 Deskriptor Elektronik .....	7
II.4.3 Deskriptor Sterik .....	8
II.5 Metode <i>ab initio</i> .....	9
II.5.1 Metode <i>ab initio</i> Hartree-Fock (HF).....	9
II.5.2 <i>Pople style basis set</i> .....	11
II.6 Metode Semiempiris .....	11
II.7 Metode <i>Density Functional Theory</i> (DFT) .....	13
II.8 <i>Multiple Linear Regression</i> .....	14
<b>BAB III. LANDASAN TEORI</b>	
III.1 Landasan Teori .....	15
III.2 Hipotesis .....	16

III.3 Rancangan Penelitian .....	16
<b>BAB IV. METODE PENELITIAN</b>	
IV.1 Bahan dan Kajian Alat.....	17
IV.1.1 Materi Kajian .....	17
IV.1.2 Bahan atau Materi Kajian.....	17
IV.2 Pemodelan Molekul .....	17
IV.3 Optimasi Geometri .....	17
IV.4 Analisis statistik HKSA .....	18
IV.4.1 Analisis <i>Multiple Linear Regression</i> (MLR) .....	18
IV.4.2 Validasi Model .....	19
<b>BAB V. HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	
V.1 <i>Training Set</i> dan <i>Test Set</i> .....	20
V.2 Optimasi Geometri <i>Training Set</i> .....	21
V.2.1 Panjang Ikatan .....	21
V.2.2 Sudut Ikatan.....	22
V.3 Deskriptor Elektronik Senyawa <i>Training Set</i> .....	23
V.3.1 Muatan Bersih .....	23
V.3.2 Energi Orbital HOMO dan LUMO.....	25
V.4 Deskriptor Hidrofobisitas Senyawa <i>Training Set</i> .....	26
V.5 Penyusunan Model Persamaan .....	27
V.6 Optimasi Geometri <i>Test Set</i> .....	28
V.6.1 Panjang Ikatan .....	28
V.6.2 Sudut ikatan.....	29
V.7 Deskriptor Muatan Bersih Senyawa <i>Test Set</i> .....	29
V.8 Deskriptor Hidrofobik Senyawa <i>Test Set</i> .....	30
V.9 Validasi Model Persamaan <i>Training Set</i> .....	31
<b>BAB VI. KESIMPULAN DAN SARAN</b>	
VI.1 Kesimpulan.....	34
VI.2 Saran .....	34
DAFTAR PUSTAKA .....	35
LAMPIRAN .....	38

## DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1	Pemodelan STO menggunakan kombinasi linier 3 GTO.....	10
Gambar IV.1	Penomora struktur inti senyawa turunan 3-benzofuran-5-aril-1- pirazolil .....	18
Gambar V.1	Struktur senyawa nomor 9 hasil optimasi dengan metode AM1.....	23
Gambar V.2	Struktur senyawa nomor 9 hasil optimasi dengan metode HF .....	23
Gambar V.3	Struktur senyawa nomor 1 (a) dan nomor 2 (b) .....	27
Gambar V.4	Plot log IC <sub>50</sub> hasil eksperimen dan hasil prediksi dengan metode AM1 (a), HF (b) dan DFT (c).....	32

## DAFTAR TABEL

Tabel V.1	Data log aktivitas antitubercular (MIC) senyawa dalam training set dan test set .....	20
Tabel V.2	Hasil analisis <i>uni-column training set</i> dan <i>test set</i> .....	21
Tabel V.3	Panjang ikatan beberapa atom pada senyawa <i>training set</i> .....	21
Tabel V.4	Sudut ikatan antara atom gugus aril dengan atom pada gugus substituen .....	22
Tabel V.5	Nilai muatan parsial atom C <sub>(11)</sub> senyawa <i>training set</i> .....	24
Tabel V.6	Nilai energi HOMO dan LUMO senyawa <i>training set</i> .....	25
Tabel V.7	Nilai log P prediksi dan aktivitas senyawa <i>training set</i> .....	26
Tabel V.8	Model persamaan HKSA hasil MLR backward dengan parameter hidrofobik, elektronik dan sterik .....	27
Tabel V.9	Panjang ikatan gugus aril dengan substituen pada beberapa senyawa pada <i>test set</i> .....	28
Tabel V.10	Sudut ikatan pada senyawa test set .....	29
Tabel V.11	Muatan bersih senyawa <i>test set</i> .....	30
Tabel V.12	Nilai log P dan log MIC senyawa <i>test set</i> .....	30
Tabel V.13	Perbandingan nilai log IC <sub>50</sub> hasil eksperimen, hasil prediksi dan nilai PRESS .....	31

## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	File <i>.log</i> hasil perhitungan orbital molekul dengan himpunan basis set 6-31G (senyawa 1) .....	38
Lampiran 2	Hasil analisis model persamaan HKSA menggunakan metode MLR.....	43
Lampiran 3	Deskriptor elektronik hasil perhitungan metode AM1 .....	38
Lampiran 4	Deskriptor sterik dan hidrofobisitas hasil perhitungan AM1 .....	50
Lampiran 5	Deskriptor elektronik hasil perhitungan metode HF.....	51
Lampiran 6	Deskriptor sterik dan hidrofobisitas hasil perhitungan HF.....	53
Lampiran 7	Deskriptor elektronik hasil perhitungan metode DFT.....	56
Lampiran 8	Deskriptor sterik dan hidrofobisitas hasil perhitungan DFT.....	57