

KAJIAN HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR DAN AKTIVITAS (HKSA) ANTIKANKER PAYUDARA TURUNAN α -MANGOSTIN MENGUNAKAN DESKRIPTOR HASIL PERHITUNGAN METODE AB INITIO HARTREE-FOCK

Izzul Abid

10/302220/PA/13409

INTISARI

Kajian Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) senyawa antikanker payudara dari senyawa turunan α -mangostin telah dilakukan dengan menggunakan deskriptor elektronik dan molekuler. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh senyawa turunan α -mangostin baru yang memiliki aktivitas lebih tinggi dari senyawa yang telah diketahui. Optimasi struktur senyawa α -mangostin dilakukan menggunakan metode *ab initio* Hartree-Fock (HF) dengan himpunan basis 6-31G untuk memodelkan struktur senyawa turunan α -mangostin. Model HKSA diperoleh dari analisis regresi multilinier (MLR) dengan metode *backward*. Persamaan HKSA terbaik untuk aktivitas antikanker payudara adalah:

$$\text{Log IC}_{50} = 11,281 + (12,742 \times \text{qC3}) + (6,041 \times \text{qC13}) + (9,439 \times \text{qO16}) + (34,034 \times \text{HOMO}) - (0,109 \times \mu)$$

$$n = 17; r = 0,774; r^2_{\text{train}} = 0,600; \text{SEE} = 0,284; F_{\text{hitung}}/F_{\text{tabel}} = 1,172$$

qC₃; qC₁₃; qO₁₆: muatan bersih atom, HOMO: Energi tertinggi orbital molekul yang terisi, μ : momen dipol

Desain senyawa turunan α -mangostin baru dengan prediksi aktivitas terbaik adalah 1,3,4,6,7-pentakis(dimetilamino)-2,8-bis(3,2,1-metilenbutenil-9H-9-santenon dengan nilai IC₅₀ prediksi $1,48 \times 10^{-6}$ M.

Kata kunci: HKSA, *ab initio*, antikanker, α -mangostin

STUDY ON QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS (QSAR) BREAST ANTICANCER OF α -MANGOSTIN DERIVATIVES USING DESCRIPTORS CALCULATED BY AB INITIO HARTREE-FOCK METHOD

Izzul Abid
10/302220/PA/13409

ABSTRACT

Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) study of α -mangostin analogues as breast anticancer agents was conducted using electronics and molecular descriptors. This research aimed to obtain new α -mangostin analogs that contain higher activity than what is already known. In addition, to get modeling structure of α -mangostin analogues, optimization of α -mangostin analogues structure was conducted using ab initio HF methods with 6-31G basis set. The QSAR models were derived from multiple linear regression (MLR) analysis with a backward method. The best QSAR equation for breast anticancer activity was:

$$\text{Log IC}_{50} = 11.281 + (12.742 \times \text{qC3}) + (6.041 \times \text{qC13}) + (9.439 \times \text{qO16}) + (34.034 \times \text{HOMO}) - (0.109 \times \mu)$$

$$n = 17; r = 0.774; r^2_{\text{train}} = 0.600; \text{SEE} = 0.284; F_{\text{hitung}}/F_{\text{tabel}} = 1.172$$

qC3; qC13; qO16: atom charge, HOMO: Highest Occupied Molecular Orbital,
 μ : momen dipol

The new design of α -mangostin analogues with the best activity prediction was 1,3,4,6,7-pentakis(dimethylamino)-2,8-bis(3-methylbut-2-en-1-yl)-9H-xanthen-9-one with predicted IC_{50} was $1,48 \times 10^{-6}$ M.

Keywords: QSAR, ab initio, anticancer, α -mangostin