

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
INTISARI	x
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	3
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 Analisis hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas	5
II.1.2 Penentuan deskriptor	6
II.1.3 Metode semiempirik PM3	7
II.1.4 Analisis kemometri untuk QSAR	8
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	12
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	12
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	12
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	13
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	13
II.2.5 Rancangan penelitian	13
BAB III METODE PENELITIAN	15
III.1 Bahan Penelitian	15
III.2 Alat Penelitian	15
III.3 Prosedur Penelitian	17
III.3.1 Optimasi geometri dan perhitungan deskriptor	17
III.3.2 Analisis MLR dan pemilihan model persamaan QSAR	17
III.3.3 Analisis QSAR menggunakan metode PCR	18
III.3.4 Analisis QSAR menggunakan metode ANN	19
III.3.5 Desain senyawa baru	19
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	19
IV.1 Pemodelan Struktur Senyawa Turunan 1,10-fenantrolin	19
IV.2 Analisis QSAR dengan Metode Regresi Multilinier	20
IV.3 Analisis QSAR dengan Metode <i>Principal Component Regression</i> (PCR)	24
IV.4 Analisis QSAR menggunakan <i>Artificial neural network</i> (ANN)	28

IV.5 Hasil Analisis QSAR	30
IV.6 Desain Senyawa Baru	33
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	35
V.1 Kesimpulan	35
V.2 Saran	35
DAFTAR PUSTAKA	36
LAMPIRAN	39

DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1	Struktur senyawa 1,10-fenantrolin	11
Gambar III.1	Penomoran struktur senyawa 1,10-fenantrolin	15
Gambar IV.1	Struktur senyawa 1,10-fenantrolin (a) tampak depan dan (b) tampak samping	19
Gambar IV.2	Plot linieritas log $1/IC_{50}$ eksperimen dengan log $1/IC_{50}$ prediksi model persamaan 3	22
Gambar IV.3	Grafik % kumulatif empat komponen pertama	25
Gambar IV.4	Korelasi antara log $1/IC_{50}$ eksperimen vs log $1/IC_{50}$ prediksi model persamaan 1	27
Gambar IV.5	Korelasi antara log $1/IC_{50}$ eksperimen vs log $1/IC_{50}$ prediksi model persamaan 2	28
Gambar IV.6	Arsitektur ANN terbaik diperoleh dengan pola 2-5-1-1	29

DAFTAR TABEL

Tabel III.1	Data substituen dan nilai aktivitas antimalaria 1,10-fenantrolin	15
Tabel IV.2	Data hasil analisis MLR	21
Tabel IV.3	Nilai initial eigenvalues hasil analisis PCA	24
Tabel IV.4	Nilai variabel laten (VL) untuk 16 senyawa	26
Tabel IV.5	Hasil analisis PCR menggunakan metode enter	26
Tabel IV.6	Bobot dari analisis ANN	29
Tabel IV.7	Bias dari analisis ANN	29
Tabel IV.8	Perbandingan hasil prediksi aktivitas senyawa 1,10-fenantrolin menggunakan metode PCR dan ANN	30
Tabel IV.9	Nilai log $1/IC_{50}$ variasi gugus substituen pada senyawa 1,10-fenantrolin	33

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Data muatan bersih atom 16 senyawa turunan 1,10-fenantrolin menggunakan metode semiempirik PM3	39
Lampiran 2	Contoh <i>file log</i> hasil optimasi	41
Lampiran 3	Hasil analisis MLR	44
Lampiran 4	Hasil analisis PCR	49
Lampiran 5	Hubungan $\log 1/IC_{50}$ eksperimen dengan $\log 1/IC_{50}$	58
Lampiran 6	Data muatan bersih atom 9 prediksi senyawa baru turunan 1,10-fenantrolin menggunakan metode semiempirik PM3	59
Lampiran 7	Nilai variabel laten (VL) untuk 9 prediksi senyawa baru	61