

KAJIAN HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR DAN AKTIVITAS ANTIMALARIA SENYAWA TURUNAN MANZAMINE MENGGUNAKAN METODE DFT

Arif Santoso

09/285210/PA/12856

INTISARI

Analisis HKSA (Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas) telah dilakukan untuk dijadikan dasar dalam mendesain senyawa antimalaria baru dari turunan Manzamine. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh senyawa Manzamine baru yang memiliki aktivitas senyawa antimalaria yang lebih baik, dibandingkan senyawa sebelumnya yang telah menjadi resisten melawan *Plasmodium falciparum*.

Parameter HKSA yang digunakan adalah sifat elektronik dan molekular dari struktur turunan Manzamine menggunakan metode DFT. Persamaan HKSA diperoleh dengan cara mengolah data eksperimen dari aktivitas antimalaria menggunakan metode analisis regresi multilinear (MLR), dari beberapa persamaan HKSA kemudian dipilih 2 persamaan yang terbaik sebagai berikut :

$$\text{Log IC}_{50} = 215,634 + (136,394 \times \text{qC1}) + (410,667 \times \text{qN2}) + (-17,681 \times \text{qC6}) + (-11,964 \times \text{qC8})$$

$$n = 15; r = 0,848 \quad r^2 = 0,858; F_{\text{hitung}}/F_{\text{tabel}} = 2,092 ; \text{PRESS} = 1,41$$

Dari persamaan HKSA terbaik dapat didesain senyawa antimalaria baru yaitu Manzamin Klorida dengan nilai IC_{50} prediksi adalah 0,58 μM .

Kata kunci : HKSA, antimalaria, Manzamine, DFT, regresi multilinear

***STUDY ON QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY
RELATIONSHIPS OF ANTIMALARIAL MANZAMINE
DERIVATIVES USING DFT METHODE***

Arif Santoso

09/285210/PA/12856

ABSTRACT

Analysis of QSAR (Quantitative Relation Structure and Activity) carried out to design new antimalarial compounds from Manzamine derivatives. This research is to obtain a new Manzamine derrivative that has better antimalarial activity in comparison with the old compounds which have been resistant against *Plasmodium falciparum*.

The electronic and molecular properties were used for QSAR parameters and calculated using DFT method. QSAR equation is obtained by processing experimental data from antimalarial activity using multilinear regression analysis method (MLR). From several QSAR equations were then selected the 2 best equations as follows:

$$\text{Log IC}_{50} = 215,634 + (136,394 \times \text{qC1}) + (410,667 \times \text{qN2}) + (-17,681 \times \text{qC6}) + (-11,964 \times \text{qC8})$$

$$n = 15; r = 0,848 \quad r^2 = 0,858; \text{Fhitung/Ftabel} = 2,092 ; \text{PRESS} = 1,41$$

The best QSAR equations were used to design a new antimalarial compound and produce Manzamine Chloride with IC₅₀ value prediction of 0,58 μM.

Keywords: QSAR, antimalarial, Manzamine, DFT, multilinear regression