UNIVERSITAS
GADJAH MADA
ANALISIS QSAR UNTUK DESAIN SENYAWA ANTIKANKER PROSTAT, PANKREAS, DAN KOLON DARI ANALOG KURKUMIN MONOKETON
ACH. KHOLISH, Dr. Winarto Haryadi, M.Si.; Prof. Dr. Harno Dwi Pranowo, M.Si.
Universitas Gadjah Mada, 2016 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

INTISARI

ANALISIS QSAR UNTUK DESAIN SENYAWA ANTIKANKER PROSTAT, PANKREAS, DAN KOLON DARI ANALOG KURKUMIN MONOKETON

Oleh:

Ach. Kholish
14/373308/PPA/04788

Analisis QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationship*) senyawa antikanker prostat, pankreas, dan kolon dari senyawa analog kurkumin monoketon telah dilakukan dengan menggunakan deskriptor elektronik dan molekuler. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh senyawa analog kurkumin monoketon baru yang memiliki aktivitas lebih tinggi dari senyawa yang telah ada sebelumnya. Optimasi molekul dilakukan dengan menggunakan metode semiempirik AM1 untuk memodelkan struktur senyawa analog kurkumin. Model QSAR didapatkan dari analisis multilinear (MLR) dengan menggunakan metode *backward*.

Persamaan QSAR terbaik untuk aktivitas antikanker prostat, pankreas dan kolon masing-masing adalah:

$LogIC_{50}$ = 10,385+(1,848×qC4)+(13,166×qC5)-(25,067×qC9)+(5,752×qC10)-(0,204×μ)+(0,172×log P)

n = 33; r = 0,852; r^2_{train} = 0,727; SEE = 0,2535; $F_{hit}F_{tab}$ = 4,4507

$LogIC_{50}$ = 9,454-(20,839×qC8)+(4,855×qC10)-(7,031×qC12)+(7,033×qO18)-(0,209×μ) + (0,108×log P)

n = 33; r = 0,873; r^2_{train} = 0,763; SEE = 0,2108; F_{hit}/F_{tab} = 5,3854

$LogIC_{50}$ = 6.418-(11.065×qC6)-(21.153×qC7)-(12.78×qC9)+(11.436×qO18)-(0.231×μ)+(0.062×log P)

n = 33; r = 0,838; r^2_{train} = 0,703; SEE = 0,2791; F_{hit}/F_{tab} = 3,9651

Desain senyawa analog kurkumin baru dengan prediksi aktivitas terbaik adalah 4,4' - ((1E,1'E) - (4 - okso - 2H – piran - 3,5 (4H, 6H) - diylidin) bis (metanililidin)) bis (2 - aminobenzaldehid); 4,4' - ((1E,1'E) - (4 – okso - 2H – piran - 3,5 (4H,6H) - diylidin) bis (metanililidin)) bis (2,6-dihidroksbenzaldehid); dan 4,4' - ((1E,1'E) - (4 – okso - 2H – piran - 3,5 (4H,6H) - diylidin) bis (metanililidin)) bis (2,6-dimetoksibenzaldehid).

Kata kunci: QSAR, AM1, antikanker, kurkumin

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
ANALISIS QSAR UNTUK DESAIN SENYAWA ANTIKANKER PROSTAT, PANKREAS, DAN KOLON DARI ANALOG KURKUMIN MONOKETON
ACH. KHOLISH, Dr. Winarto Haryadi, M.Si.; Prof. Dr. Harno Dwi Pranowo, M.Si.
Universitas Gadjah Mada, 2016 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

ABSTRACT

QSAR ANALYSIS FOR DESIGNING PROSTATE, PANCREAS, AND COLON ANTICANCER COMPOUNDS FROM MONOKETONE CURCUMIN ANALOGS

by:

Ach. Kholish
14/373308/PPA/04788

QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) analysis of monoketone curcumin analogs as prostate, pancreas, and colon anticancer agents has been conducted using electronic and molecular descriptors. This reserch aimed to obtain new monoketone curcumin analogs that had higher activity than the compounds that have been there before. Optimization molecules has been performed using the AM1 method for modeling the structure of the curcumin analogues. QSAR models derived from multiple linear regression (MLR) analysis by using a backward method.

The best QSAR equation for prostate, pancreatic and colon anticancer activity is:

$LogIC_{50}$ = 10,385+(1,848×qC4)+(13,166×qC5)-(25,067×qC9)+(5,752×qC10)-(0,204×μ)+(0,172×log P)

n = 33; r = 0,852; r^2_{train} = 0,727; SEE = 0,2535; $F_{hit}F_{tab}$ = 4,4507

$LogIC_{50}$ = 9,454-(20,839×qC8)+(4,855×qC10)-(7,031×qC12)+(7,033×qO18)-(0,209×μ) + (0,108×log P)

n = 33; r = 0,873; r^2_{train} = 0,763; SEE = 0,2108; F_{hit}/F_{tab} = 5,3854

$LogIC_{50}$ = 6.418-(11.065×qC6)-(21.153×qC7)-(12.78×qC9)+(11.436×qO18)-(0.231×μ)+(0.062×log P)

n = 33; r = 0,838; r^2_{train} = 0,703; SEE = 0,2791; F_{hit}/F_{tab} = 3,9651

The new design of curcumin analog with the best activity prediction are 4,4' - ((1E,1'E) - (4 – oxo - 2H – pyran - 3,5 (4H, 6H) - diylidene) bis (methanylylidene)) bis (2-aminobenzaldehyde); 4,4' - ((1E, 1'E) - (4 – oxo - 2H – pyran - 3,5 (4H, 6H) - diylidene) bis (methanylylidene)) bis (2, 6-dihydroxybenzaldehyde); and 4,4' - ((1E, 1'E) - (4 – oxo - 2H – pyran - 3,5 (4H, 6H) - diylidene) bis (methanylylidene)) bis (2, 6 - dimethoxybenzaldehyde)

Keywords: QSAR, AM1, anticancer, curcumin