

**DESAIN TURUNAN MENTOL SEBAGAI SENYAWA ANTIBAKTERI
TERHADAP *Escherichia coli* BERDASARKAN KAJIAN HUBUNGAN
KUANTITATIF STRUKTUR-AKTIVITAS**

Brahmana Bonankumara Aji

16/394116/PA/17207

INTISARI

Desain senyawa turunan mentol berdasarkan kajian hubungan kuantitatif struktur-aktivitas (HKSA) telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan persamaan hubungan kuantitatif struktur-aktivitas terbaik serta mendesain senyawa baru turunan mentol sebagai antibakteri. Langkah penentuan persamaan HKSA terbaik yaitu dilakukan validasi metode kimia komputasi untuk optimasi geometri senyawa turunan mentol dengan cara membandingkan nilai pergeseran kimia H-NMR eksperimen dengan hasil perhitungan metode kimia komputasi berupa *Density Functional Theory* (DFT), Hartree-Fock (HF), dan semi empiris. Setelah diperoleh metode yang valid, dilakukan optimasi geometri 26 seri senyawa turunan mentol dengan menggunakan metode kimia komputasi yang telah tervalidasi untuk mendapatkan nilai deskriptor. Nilai deskriptor tersebut digunakan untuk analisis statistik menggunakan metode regresi multilinier, untuk mendapatkan persamaan HKSA terbaik. Kemudian persamaan tersebut digunakan untuk mendesain senyawa baru dengan cara memodifikasi substituen pada struktur senyawa turunan mentol.

Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa persamaan HKSA terbaik yaitu $pMIC_{50} = -2,268 - (105,725 \times qC5) + (114,737 \times qC7) + (0,049 \times \text{momen dipol}) + (0,024 \times \text{polarisabilitas})$ dengan parameter statistika $n = 26$, $R^2 = 0,836$; $SEE = 0,076$; $F_{hitung}/F_{tabel} = 6,286$; dan $PRESS = 0,094$. Persamaan tersebut digunakan untuk mendesain senyawa baru turunan mentol dan yang memiliki aktivitas antibakteri lebih tinggi yaitu senyawa 4-(2-isopropil-5-metilsikloheksil)-1-metil-2-nitrotereftalat dengan $pMIC_{50}$ sebesar 2,525 g/L.

Kata kunci: antibakteri, HKSA, turunan mentol, MLR, retrosintesis

***DESIGN OF MENTHOL DERIVATIVES AS ANTIBACTERIAL
COMPOUND AGAINST *Escherichia coli* BASED ON QUANTITATIVE
STRUCTUR-ACTIVITY RELATIONSHIP STUDY***

Brahmana Bonankumara Aji

16/394116/PA/17207

ABSTRACT

Design of menthol derivatives compound has been carried out based on quantitative structure-activity relationship (QSAR). This study aims to determine the best quantitative structure-activity relationship (QSAR) equation and to design a new compound derived from menthol as an antibacterial compound. The step in determining the best HKSA equation is to validate the computational chemistry method for geometry optimization of menthol derivative compounds by comparing the experimental H-NMR chemical shift value with the results of computational chemical methods calculations in the form of Density Functional Theory (DFT), Hartree-Fock (HF), and semi empirical. After obtaining a valid method, the geometry optimization of 26 series of menthol derivative compounds was carried out using a validated computational chemistry method to obtain the descriptor value. The descriptor value is used for statistical analysis using the multilinear regression method, from this analysis the best HKSA equation will be obtained. Then the equation is used to design a new compound by modifying the substituent structure of the menthol derivative compound.

The result shows that the best QSAR equation was $pMIC_{50} = -2.268 - (105.725 \times qC_5) + (114.737 \times qC_7) + (0.049 \times \text{dipole moment}) + (0.024 \times \text{polarizability})$ with statistical parameters $n = 26$, $R^2 = 0.836$, $SEE = 0.076$, $F_{hitung}/F_{tabel} = 6.286$, and $PRESS = 0.094$. This equation was used to design new menthol derivative compound that has higher equation activity which is 4-(2-isopropyl-5-methylcyclohexyl) 1-methyl 2-nitroterephthalate with $pMIC_{50}$ of 2.525 g/L.

Keywords: antibacterial, QSAR, menthol derivatives, MLR, retrosynthesis