

**PENGARUH SIFAT ELEKTRONIK DAN MOLEKULER TERHADAP
AKTIVITAS ANTIMALARIA PADA TURUNAN *SULFONYL-PHENYL-
UREIDO BENZAMIDINES***

PRADITYA TIMOR NUGROHO
09/283627/PA/12638

INTISARI

Pengaruh sifat elektronik dan molekuler terhadap aktivitas antimalaria pada turunan *Sulfonyl-phenyl-ureido benzamidines* telah dilakukan. Sifat elektronik yang digunakan sebagai deskriptor pada analisis *QSAR* adalah muatan atom (q) dan sifat molekulernya adalah *log P*, *dipole moment*, *surface area*, *refraktivitas*, *volume*, *hidrasi energi*, *polarisabilitas*, dan *massa*. Cara memperoleh deskriptor tersebut adalah dengan melakukan optimasi geometri struktur turunan *Sulfonyl-phenyl-ureido benzamidines* dengan menggunakan metode komputasi *AMI*, *PM3*, dan *HF*. Perbandingan aktivitas IC_{50} hasil prediksi metode komputasi *AMI*, *PM3*, dan *HF* dilakukan untuk mengetahui akurasi terhadap struktur obat baru yang diusulkan. Hasil analisis *QSAR* menunjukkan bahwa deskriptor elektronik lebih berpengaruh terhadap IC_{50} dibandingkan deskriptor molekuler. Metode komputasi *AMI* memberikan hasil deskriptor elektronik lebih baik dalam memprediksi IC_{50} (aktivitas antimalaria) dibandingkan metode komputasi *PM3* dan *HF* pada turunan *Sulfonyl-phenyl-ureido benzamidines*.

Kata kunci: antimalaria, *QSAR*, *PM3*, *AMI*, *HF*

***EFFECT OF ELECTRONIC AND MOLECULAR PROPERTIES ON THE
ANTIMALARIAL ACTIVITY OF SULFONYL-PHENYL-UREIDO
BENZAMIDINES DERIVATIVES***

PRADITYA TIMOR NUGROHO
09/283627/PA/12638

ABSTRACT

Effect of electronic and molecular properties of the antimalarial activity on Sulfonyl-phenyl-ureido benzamidines derivative has been performed. Electronic property used as a descriptors in QSAR analysis is the atomic charge (q) and for molecular properties are log P, dipole moment, surface area, refraktivitas, volume, hidrasi energy, polarisabilitas, and massa. To obtain the descriptors geometry optimizations were performed for Sulfonyl-phenyl-ureido benzamidines derivatives using AM1, PM3, and HF computation methods. Comparing the results of IC₅₀ activity predictions obtained from AM1, PM3, and HF computation method were conducted to determine the accuracy of the proposed structure of the new drug. QSAR analysis results show that the electronic descriptors take more effect on the IC₅₀ in comparison with molecular descriptors. AM1 computational method contributes electronic descriptors results in better IC₅₀ prediction (antimalarial activity) then PM3 and HF computation methods on Sulfonyl-phenyl-ureido benzamidines derivatives.

Keywords : antimalaria, QSAR, PM3, AM1, HF