

ANALISIS QSAR (*QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP*) UNTUK MENDESAIN SENYAWA ANTIMALARIA BARU DARI TURUNAN KALKON

Masitoh

11/316900/PA/14019

INTISARI

Analisis QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationship*) telah dilakukan untuk mendesain senyawa antimalaria baru dari turunan kalkon. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh senyawa kalkon baru yang memiliki aktivitas antimalaria yang lebih baik dibandingkan senyawa sebelumnya yang telah menjadi resisten melawan *Plasmodium falciparum*.

Dalam mendesain senyawa baru, analisis QSAR dilakukan untuk mengetahui hubungan antara struktur dan aktivitas antimalaria senyawa turunan kalkon. Parameter QSAR yang digunakan adalah sifat elektronik dan molekuler dari struktur turunan kalkon. Parameter tersebut diperoleh dengan cara memodelkan senyawa turunan kalkon menggunakan metode semiempirik AM1. Persamaan QSAR diperoleh dengan cara mengolah data eksperimen dari aktivitas antimalaria menggunakan metode analisis regresi multilinear (MLR). Dari beberapa persamaan QSAR kemudian dipilih persamaan terbaik sebagai berikut:

$$\text{LogIC}_{50} = 35,709 - (94,210 \times qC) + (31,486 \times qC1') + (10,006 \times qC4')$$

$$\text{SD} = 1,1679; \text{PRESS} = 7,6737; F_{\text{hitung}} / F_{\text{tabel}} = 3,5012$$

Dari persamaan QSAR terbaik dapat didesain senyawa antimalaria baru yaitu senyawa (2E)-3-fenil-1-[4-(2,2,2-trifluorometil)fenil]prop-2-en-1-on dengan nilai IC_{50} prediksi 1,14 μM .

Kata kunci: QSAR, antimalaria, kalkon, semiempirik, AM1, regresi multilinear.

***QSAR (QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP) ANALYSIS
FOR DESIGNING NEW ANTIMALARIAL COMPOUNDS FROM CHALCONE
DERIVATIVES***

Masitoh

11/316900/PA/14019

ABSTRACT

QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationship*) analysis has been done to design new antimalarial chalcone derivatives. This research is to obtain new chalcone derivatives that have better antimalarial activity in comparison with the old compounds which have been resistant against *Plasmodium falciparum*.

For designing the new compounds, QSAR analysis was carried out to find the relationship between structural properties and antimalarial activity of the chalcone derivatives. The electronic and molecular properties of the chalcone structure were chosen as QSAR parameters. The parameters were obtained from calculating the chalcone derivative structures with semiempirical AM1 method. QSAR equation was obtained from fitting experiment data of the antimalarial activity using multiple linear regression (MLR) method. To design better antimalarial activity, the best QSAR equation has been chosen as follow:

$$\text{LogIC}_{50} = 35,709 - (94,210 \times qC) + (31,486 \times qC1') + (10,006 \times qC4') \\ \text{SD} = 1,1679; \text{PRESS} = 7,6737; F_{\text{hitung}} / F_{\text{tabel}} = 3,5012$$

Based on this equation, a new compound has been designed as (2*E*)-3-phenyl-1-[4-(2,2,2-trifluoromethyl)phenyl]prop-2-en-1-one with predicted IC₅₀ of 1,14 μM.

Key words: QSAR, antimalarial, chalcone, MLR, semiempiric, AM1.