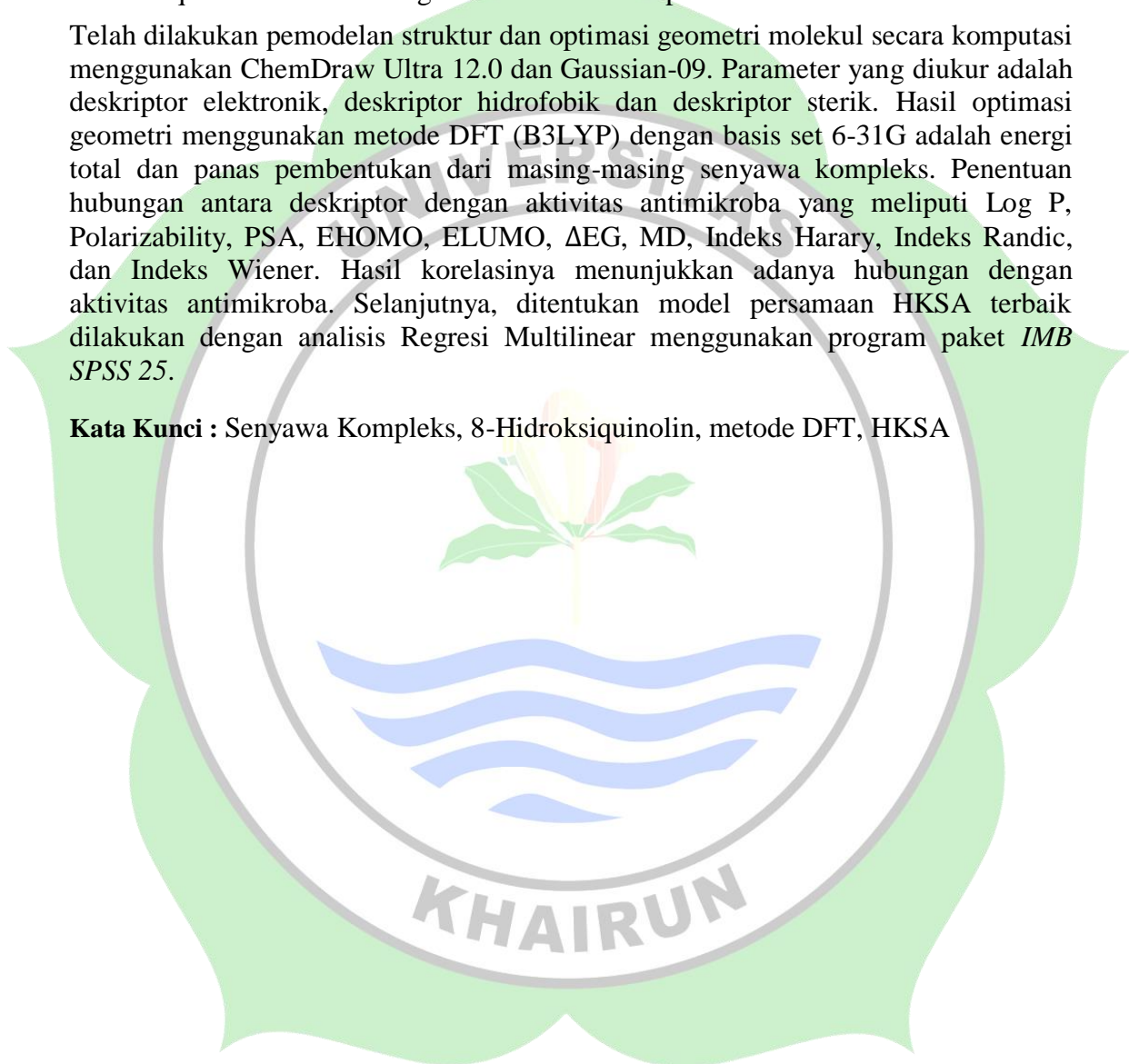


ABSTRAK

Sutriyani Marjan, 2022. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas Antimikroba *Escherichia Coli* menggunakan Kompleks Fe, Cu, Co, Ni, Zn dengan 8-Hidroksiquinolin. Pembimbing Dr. Muliadi dan Topan Setiawan.

Telah dilakukan pemodelan struktur dan optimasi geometri molekul secara komputasi menggunakan ChemDraw Ultra 12.0 dan Gaussian-09. Parameter yang diukur adalah deskriptor elektronik, deskriptor hidrofobik dan deskriptor sterik. Hasil optimasi geometri menggunakan metode DFT (B3LYP) dengan basis set 6-31G adalah energi total dan panas pembentukan dari masing-masing senyawa kompleks. Penentuan hubungan antara deskriptor dengan aktivitas antimikroba yang meliputi Log P, Polarizability, PSA, EHOMO, ELUMO, Δ EG, MD, Indeks Harary, Indeks Randic, dan Indeks Wiener. Hasil korelasinya menunjukkan adanya hubungan dengan aktivitas antimikroba. Selanjutnya, ditentukan model persamaan HKSA terbaik dilakukan dengan analisis Regresi Multilinear menggunakan program paket *IMB SPSS 25*.

Kata Kunci : Senyawa Kompleks, 8-Hidroksiquinolin, metode DFT, HKSA



ABSTRACT

Sutriyani Marjan, 2022. Quantitative Relationship Analysis of The Structure of Antimicrobial Activity of Escherichia Coli using The Complex of Fe, Cu, Co, Ni, Zn with 8-Hydroxyquinolin. Supervisor Dr. Muliadi and Topan Setiawan.

Structural modeling and computational optimization of molecular geometry have been carried out using ChemDraw Ultra 12.0 and Gaussian-09. The measured parameters are electronic descriptors, hydrophobic descriptors and steric descriptors. The result of geometry optimization using the DFT method (B3LYP) with a set base of 6-31G is the total energy and heat of formation of each complex compound. Determination of the relationship between descriptors and antimicrobial activity which includes Log P, Polarizability, PSA, EHOMO, ELUMO, Δ EG, MD, Harary Index, Randic Index, and Wiener Index. The results of the correlation indicate a relationship with antimicrobial activity. Furthermore, the best HKSA equation model was determined by multilinear regression analysis using the SPSS 25 IMB package program.

Keywords : Complex Compound, 8-Hydroxyquinolin, DFT Method, HKSA

