

## ABSTRAK

Hasbul B. Karim 2019. Kajian Senyawa Turunan Benzopirazin Sebagai Antimalaria Menggunakan Metode Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas Dan Regresi Multilinear. Pembimbing Nur Asbirayani Limatahu dan Khusna Arif Rakhman.

Penelitian ini bertujuan untuk menentukan pemodelan struktur molekul, penentuan hubungan antara deskriptor dengan aktivitas antimalaria ( $IC_{50Eksperimen}$ ) dan penentuan model persamaan HKSA terbaik pada senyawa benzopirazin dengan substitusi gugus (R7) pendonor elektron seperti : Br (A1), COOH (A2),  $NH_2$ (3),  $NH_3$ (A4), OH (A5) dan  $C_5H_6$  (A6). Pemodelan struktur molekul telah dilakukan secara komputasi dengan menggunakan paket program *hyperchem 8.0.10*. Hasil optimasi geometri menggunakan metode semi empiris AM1 menghasilkan energi total dari masing-masing senyawa dari senyawa A1-A6 berturut-turut adalah : A1:-84728.9404102 kkal/mol, A2: -94641.4692058 kkal/mol, A3: -81997.5068263 kkal/mol, A4: -82143.4897420 kkal/mol, A5: -84291.5160760 kkal/mol dan A6: -95873.5271246 kkal/mol. Penentuan hubungan antara deskriptor (elektronik dan hidrofobik) dengan aktivitas antimalaria ( $IC_{50Eksperimen}$ ) dilakukan dengan menggunakan analisis korelasi yang terdapat dalam program *SPSS 22*. Hasil analisis korelasi menunjukkan terdapat adanya hubungan antara deskriptor dengan aktivitas antimalaria ( $IC_{50Eksperimen}$ ) yaitu EHOMO, ELUMO,  $\Delta EG$ , MD, qC1, qC2, qC3, qC4, qC5, qC6, qN7, qC8, qC9, qN10, qC11, qC12, qC13, qN14, qO15, qO16, qO18, qC19, qC20, Log P, Polari, SAG, SAA dan EH dengan nilai signifikan sebesar 0.05. Penentuan model persamaan HKSA terbaik dilakukan dengan menganalisis regresi multilinear menggunakan program *SPSS 22*. Hasil analisis yang didapatkan untuk model persamaan HKSA terbaik terdapat pada persamaan model 4:  $\text{Log } 1/IC_{50} = 2.357 - (0.041) EH + (0.297) \text{ Polari} - (0.024) SAG - (0.043) ELUMO$  dengan  $n = 6$ ,  $R = 0.963$ ,  $R^2 = 0.928$ ,  $SE = 0.08827$ ,  $PRESS = 0.5971580176$ .

**Kata Kunci:** Benzopirazin, Optimasi Geometri, Metode HKSA, Regresi Multilinear

