

ABSTRAK

Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Senyawa Turunan Metronidazol Ariloksi Sebagai Antikanker Payudara Menggunakan Metode Semi Empiris AM1

Qory Sidwa Jufri

Senyawa turunan metronidazol ariloksi yang berpotensi sebagai antikanker payudara perlu dianalisis secara *in silico*. Tujuan penelitian ini adalah untuk menganalisis sifat fisika-kimia atau deskriptor yang berpengaruh terhadap aktivitas serta untuk mengetahui model persamaan HKSA terbaik senyawa turunan metronidazol ariloksi sebagai antikanker payudara. Metode komputasi yang digunakan dalam penelitian ini adalah semiempiris AM1 (*Austin Model 1*) dengan aplikasi *Hyperchem* dan analisis data dilakukan melakukan analisis korelasi dan regresi multilinier dengan metode *Backward* menggunakan aplikasi SPSS. Dari hasil penelitian diperoleh empat model persamaan HKSA yang menyatakan hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas serta model terbaik dengan persamaan

$$\text{Log IC}_{50} = 14.873 + (102,786 \cdot qO_{12}) + (0,219 \cdot MD) - (246,463 \cdot qC_{11}) + (0,237 \cdot EH) + (0,223 \cdot \text{Polarisabilitas}) - (83,523 \cdot qC_{10}) - (0,031 \cdot \text{massa}) + (0,146 \cdot \text{LogP})$$

$$n = 8; R = 0,976; R^2 = 0,953; SE = 0,12; \text{Sig} = 0,02; \text{PRESS} = 0,070.$$

Penelitian ini menunjukkan bahwa muatan atom bersih qC_{11} , qC_{10} , qO_{12} , momen dipol, energi hidrasi, polarisabilitas, massa dan LogP adalah deskriptor yang paling mempengaruhi aktivitas biologis senyawa turunan metronidazol ariloksi sebagai antikanker payudara. Serta yang dapat meningkatkan aktivitas adalah deskriptor muatan atom bersih qC_{11} dan menurunkan aktivitas adalah deskriptor muatan atom bersih qO_{12} .

Kata Kunci : HKSA, AM1, metronidazol ariloksi, antikanker, analisis statistik