

INTISARI

NURMAKRUF, C., 2021, PREDIKSI POTENSI DEPIGMENTASI TOPIKAL SENYAWA TURUNAN RETINOID MENGGUNAKAN HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR DAN AKTIVITAS (HKSA), SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Turunan retinoid terbukti memiliki potensi depigmentasi yang baik, meskipun jendela terapinya lebih sempit karena toksisitas yang lebih tinggi. HKSA dilakukan pada senyawa turunan retinoid sebagai kandidat agen depigmentasi topikal baru. Tujuan penelitian ini adalah untuk mendapatkan persamaan HKSA yang dapat dijadikan sebagai model untuk memprediksi aktivitas depigmentasi dari senyawa turunan retinoid sehingga didapatkan rancangan senyawa turunan retinoid yang memiliki aktivitas depigmentasi yang lebih baik.

Penelitian ini menggunakan delapan senyawa turunan retinoid yang telah memiliki aktivitas depigmentasi eksperimen yang dibagi dua kelompok yaitu *training sets* dan *test set*. Senyawa dioptimasi dan dihitung nilai deskriptornya dengan web OCHEM. Nilai deskriptor dan aktivitas depigmentasi dari senyawa *training sets* diregresikan menggunakan *PSPP 1.4.1* dengan metode enter. Deskriptor yang berpengaruh adalah MW, Homo, dan Lumo.

Persamaan HKSA yang diperoleh yaitu $IC_{50} \text{ depigmentasi} = 203,6 + (0,19 * MW) + (31,01 * Homo) - (25,91 * Lumo)$ dengan kriteria statistik $R = 1$; $R^2 = 1$; $F_{hitung/tabel} = 38,69$; $q^2 = 0,96$; dan $R^2_{prediksi} = 0,7519$. Modifikasi yang dilakukan belum mendapatkan senyawa dengan hasil prediksi aktivitas depigmentasi yang lebih baik.

Kata Kunci: Senyawa turunan retinoid, Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA), deskriptor, IC50 depigmentasi

ABSTRACT

NURMAKRUF, C., 2021, POTENTIAL PREDICTION OF TOPICAL DEPIGMENTATION OF RETINOID DERIVATIVES USING QUANTITATIVE OF STRUCTURE AND ACTIVITY RELATIONSHIP (QSAR), SKRIPSI, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA.

Retinoid derivatives have been shown to have good depigmenting potential, although the therapeutic window is narrower due to their higher toxicity. Quantitative structure and activity relationship studies were conducted on retinoid-derived compounds as candidates for new topical depigmenting agents. The purpose of this study was to obtain the HKSA equation that can be used as a model to predict depigmentation activity of retinoid derivative compounds in order to obtain a design of retinoid derived compounds that have better depigmentation activity.

This study used eight retinoid-derived compounds that had experimental depigmentation activity which were divided into two groups, namely training sets and test sets. Compounds were optimized and descriptor values were calculated using the OCHEM web. The descriptor value and depigmentation activity of the training set compounds were regressed using PSPP 1.4.1 using the enter method. The influential descriptors are MW, HOMO, and LUMO.

QSAR equation obtained was $IC_{50} \text{ depigmentation} = 203,6 + (0,19 * MW) + (31,01 * HOMO) - (25,91 * LUMO)$ with statistical criteria $R = 1$; $R^2 = 1$; $F_{\text{count/table}} = 38.69$; $q^2 = 0.96$; and $R^2 \text{ prediction} = 0.7519$. The modifications made have not yet obtained compounds with better predictive results of depigmentation activity.

Keywords: Retinoid derivative compounds, Quantitative Structure and Activity Relationship (QSAR), descriptors, IC_{50} depigmentation.