

INTISARI

YOSEPH ERVAN MALLINGARA, 2022, KAJIAN HKSA SENYAWA TIOFENA TERHADAP *Staphylococcus aureus*, SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. Nuraini Harmastuti, S.Si., M.Si. dan apt. Fransiska Leviana, S.Farm., M.Sc.

Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA) atau Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) adalah hubungan matematis yang menghubungkan struktur kimia dan aktivitas farmakologis secara kuantitatif untuk serangkaian senyawa. Tiofena adalah senyawa aromatic heterosiklik berdasarkan cincin beranggotalima yang terdiri dari satu atom belerang dan empat karbon. Tujuan penelitian ini adalah untuk Menghasilkan model persamaan HKSA yang terbaik untuk senyawa turunan thiofena yang beraktivitas antibakteri.

Penelitian ini menggunakan 18 senyawa yang dibagi menjadi dua kelompok yaitu 15 senyawa (training sets) dan 3 senyawa (test sets). Sebanyak 13 deskriptor dihitung nilainya yang mewakili parameter hidrofobik, parameter elektronik, dan parameter sterik. Nilai descriptor dan aktifitas Log 1/IC50 eksperimen dari senyawa training sets diregresikan dengan BuildQSAR. Senyawa dengan nilai terendah adalah senyawa yang paling baik karena memiliki kemampuan inhibisi yang baik.

Hasil penelitian menyatakan bahwa deskriptor yang berpengaruh ialah qC1, dan HF dengan persamaan HKSA terbaik adalah $MIC = + 5799.1538(\pm 2312.7548)qC1 - 238.5846(\pm 89.7130)qN10 - 7.5366(\pm 2.9209)HOMO + 0.1530(\pm 0.0709)Ehidrasi + 0.0237(\pm 0.0180)HF + 157.8556(\pm 71.2827)$ (n = 15; R = 0.920 ;s = 0.474 ;F = 9.915; Q2 = 0.501 ;SPress = 0.854 ;SDEP = 0.685) Fhitung/tabel = 9,915. Serta senyawa hasil rancangan yang memiliki nilai prediksi aktivitas lebih poten ialah Ethyl (E)-2-((1-(2-iodophenyl)ethylidene)amino)-4,5,6,7-tetrahydrobenzo[b]thiophene-3-carboxylate dengan nilai IC50 sebesar 0,12 (μ M).

Kata kunci : Antibakteri, BuildQSAR, HKSA, Tiofena

ABSTRACT

YOSEPH ERVAN MALLINGARA, 2022, HKSA STUDY OF THIOPHENE COMPOUNDS ON *Staphylococcus aureus*, THESIS, STUDY PROGRAM OF PHARMACEUTICAL STUDY, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA. Supervised by Dr. Nuraini Harmastuti, S.Si.,M.Sc. and apt. Fransiska Leviana, S.Farm., M.Sc.

Quantitative Structure-Activity Relationships (HKSA) or Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) are mathematical relationships that relate chemical structure and pharmacological activity quantitatively for a series of compounds. Thiophene is a heterocyclic aromatic compound based on a five-membered ring consisting of one sulfur atom and four carbons. The aim of this study was to produce the best HKSA equation model for thiophene derivatives with antibacterial activity.

This study used 18 compounds which were divided into two groups, namely 15 compounds (training sets) and 3 compounds (test sets). A total of 13 descriptors were calculated representing hydrophobic parameters, electronic parameters, and steric parameters. Log 1/IC₅₀ activity and descriptor values of the experimental compounds from the training sets were regressed with BuildQSAR. The compound with the lowest value is the best compound because it has good inhibition ability.

The results showed that the most influential descriptor was qC1, and the HF with the best HKSA equation was $MIC = + 5799.1538 (\pm 2312.7548) qC1 - 238.5846 (\pm 89.7130) qN10 - 7.5366 (\pm 2.9209) HOMO + 0.1530 (\pm 0.0709) E_{hydration} + 0.0237 (\pm 0.0180) HF + 157.8556 (\pm 71.2827)$ (n = 15; R = 0.920 ;s = 0.474 ;F = 9.915 ;Q₂ = 0.501 ;SPress = 0.854 ;SDEP = 0.685) Fcount/table = 9.915. Also the designed compound which has a more potent activity predictive value is Ethyl (E)-2-((1-(2-iodophenyl) ethylidene) amino)-4,5,6,7 tetrahydrobenzo [b] thiophene-3-carboxylate with a value IC₅₀ of 0.12 (μM).

Key words : Antibacterial, BuildQSAR, HKSA, Thiophene