

ABSTRAK

Senyawa turunan 1,3,4-*thiadiazole* memiliki aktivitas anti-inflamasi yang cukup baik dan berpotensi digunakan sebagai obat anti-inflamasi. Kajian Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) dilakukan terhadap senyawa turunan 1,3,4 *thiadiazole* untuk memperoleh persamaan yang dapat memprediksi nilai aktivitas anti-inflamasi dari senyawa turunan 1,3,4-*thiadiazole* lainnya yang lebih potensial. Bahan penelitian ini adalah data eksperimen aktivitas biologis dari 28 senyawa turunan 1,3,4 *thiadiazole* yang terbagi menjadi 25 senyawa *fitting* dan 3 senyawa uji. Analisis HKSA dilakukan berdasarkan perhitungan regresi multilinear terhadap senyawa turunan 1,3,4 *thiadiazole* dengan memplotkan log BA sebagai variabel terikat dan variabel bebasnya adalah deskriptor berupa muatan bersih atom karbon dan nitrogen yang terikat pada gugus ganti (qC_1 , qC_{15} , qN), momen dwikutub (μ), energi HOMO, energi LUMO, log P, polarisabilitas(α), berat molekul (BM), volume van der waals (V_{vdw}) dan energi hidrasi. Nilai deskriptor diperoleh dari perhitungan menggunakan metode mekanika kuantum semiempiris *parameterized model 3* (PM3). Persamaan HKSA yang dihasilkan adalah:

$$\text{Log BA} = 63,638 - 7,296(qC_1) + 14,483(qC_{15}) + 1,203(\text{Log P}) - 0,315(\mu) - 0,184(\alpha) - 0,506(E_{\text{Hidrasi}}) + 7,288(E_{\text{HOMO}}) - 1,219(E_{\text{LUMO}})$$

$n = 28$, $r = 0,861$, $SE = 0,16099$, $F_{\text{Hitung}}/F_{\text{Tabel}} = 2,7399$, $PRESS = 0,5103$

Kata kunci: HKSA, 1,3,4 *thiadiazole*, anti-inflamasi, PM3, regresi multilinear.

ABSTRACT

1,3,4-Thiadiazole derivative compounds have good anti-inflammatory activity and potentially used as anti-inflammatory drugs. Quantitative Relationship Structure and Activity Relationship (QSAR) studies have been conducted on the anti-inflammatory activity of a series of 1,3,4-thiadiazole derivatives which aim to obtain an equation to predict the value of the anti-inflammatory activity. As research material was experimental biological activity data of 28 1,3,4-thiadiazole derivatives which were divided into 25 fitting compounds and 3 test compounds. QSAR analysis was carried out based on multiple linear regression (MLR) calculations of 1.3.4 thiadiazole derivatives by plotting log BA as the dependent variable and the independent variable was a descriptor was the net charge of carbon and nitrogen atoms bound to the dressing group (qC_1 , qC_{15} , qN), dipole moment (μ), HOMO energy, LUMO energy, log P, polarisability (α), molecular weight (BM), van der waals volume (Vvdw) and hydration energy. Descriptors were obtained from calculations using the quantum mechanics semi-empirical parameterized model 3 (PM3) method. The result QSAR equation was:

$$\text{Log BA} = 63.638 - 7.296(qC_1) + 14.483(qC_{15}) + 1.203(\text{Log } P) - 0.315(\mu) - 0.184(\alpha) - 0.506(E_{\text{Hydration}}) + 7.288(E_{\text{HOMO}}) - 1.219(E_{\text{LUMO}})$$

$n = 28$, $r = 0.861$, $SE = 0.16099$, $F_{\text{calculate}} / F_{\text{table}} = 2.7399$, $PRESS = 0.5103$

Keywords: QSAR, 1,3,4-thiadiazole, anti-inflammatory, PM3, MLR