

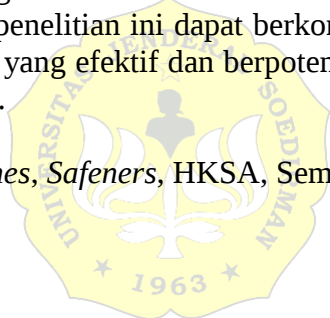
ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis hubungan kuantitatif antara struktur dan aktivitas senyawa turunan *phenylpyrimidines* sebagai herbisida *safeners* menggunakan metode Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA). Herbisida *safeners* merupakan agen yang membantu tanaman bertahan dari efek toksik herbisida, dan senyawa turunan *phenylpyrimidines* telah menunjukkan potensi sebagai herbisida *safeners* yang efektif. Melalui teknik kimia komputasi menggunakan *software* GaussView, HyperChem, dan DTC-QSAR Tools, penelitian ini membangun model HKSA menggunakan metode Semi Empiris AM1. Hasil penelitian menunjukkan bahwa deskriptor yang mempengaruhi aktivitas senyawa turunan *phenylpyrimidines* sebagai herbisida *safeners* dapat dijelaskan dengan model HKSA:

$$\log EC_{50} = 4,9537 - 0,0062(SAA) + 0,2082(Pol) + 72,8266(qC_8) - 0,0022(Mass)$$

Model tersebut memiliki kualitas yang baik dilihat dari nilai R^2 sebesar 0,9898 dengan *Mean Absolute Error* hanya 0,047. Penelitian ini memberikan wawasan penting tentang faktor-faktor struktural yang dapat memberikan panduan desain dan sintesis senyawa yang lebih efisien untuk digunakan sebagai herbisida *safeners*. Diharapkan hasil penelitian ini dapat berkontribusi pada pengembangan senyawa herbisida *safening* yang efektif dan berpotensi sebagai alat pengendalian hama dan penyakit tanaman.

Kata kunci: *Phenylpyrimidines*, *Safeners*, HKSA, Semi Empiris.



ABSTRACT

This study aims to analyze the quantitative relationship between the structure and activity of phenylpyrimidine derivatives as herbicide safeners using Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) methods. Herbicide safeners are agents that help plants withstand the toxic effects of herbicides, and phenylpyrimidine derivatives have shown potential as effective herbicide safeners. Through computational chemistry techniques using GaussView, HyperChem, and DTC-QSAR Tools software, this study constructed a QSAR model using Semi Empirical AM1 methode. The results indicated that the descriptors influencing the activity of phenylpyrimidine derivatives as herbicide safeners can be explained by the QSAR equation:

$$\log EC_{50} = 4,9537 - 0,0062(SAA) + 0,2082(Pol) + 72,8266(qC_8) - 0,0022(Mass)$$

The model had good quality as seen from the R^2 value of 0.9898 with a Mean Absolute Error of only 0.047. This research provides valuable insights into the structural factors that could guide the design and synthesis of more efficient compounds to be used as herbicide safeners. These findings are expected to contribute to the development of effective herbicide safening compounds with potential applications in pest and disease control.

Keywords: Phenylpyrimidines, Safeners, QSAR, Semi Empirical.

