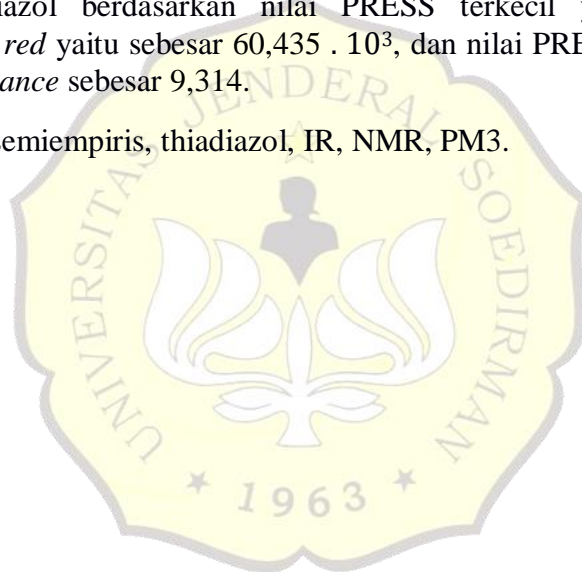


ABSTRAK

Thiadiazol merupakan senyawa heterosiklik yang masih dikembangkan hingga saat ini karena memiliki spektrum farmakologis yang luas sehingga berpotensi dalam pengembangan obat-obatan. Turunan thiadiazol yang digunakan dalam penelitian ini yaitu 2-amino-5-aril-1,3,4-thiadiazol. Manfaat 2-amino-5-aril-1,3,4-thiadiazol diantaranya yaitu sebagai anti-bakteri, anti-inflamasi dan analgesik. Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk memvalidasi dua belas metode yang terdapat pada metode semiempiris. Validasi dilakukan dengan cara memilih salah satu dari dua belas metode pada metode semiempiris yang paling cocok untuk senyawa 2-amino-5-aril-1,3,4-thiadiazol. Variasi dalam penelitian ini yaitu spektrum *infra red* (IR) dan spektrum *nuclear magnetic resonance* (NMR), yang selanjutnya dilakukan perhitungan *Predicted Residual of Sum Squares* (PRESS) agar mengetahui metode mana yang paling cocok untuk senyawa 2-amino-5-aril-1,3,4-thiadiazol. Hasil penelitian menunjukkan bahwa metode *parameterized model 3* (PM3) merupakan metode yang paling sesuai untuk senyawa 2-amino-5-aril-1,3,4-thiadiazol berdasarkan nilai PRESS terkecil yang diperoleh dari spektrum *infra red* yaitu sebesar $60,435 \cdot 10^3$, dan nilai PRESS spektrum *nuclear magnetic resonance* sebesar 9,314.

Kata Kunci : semiempiris, thiadiazol, IR, NMR, PM3.



ABSTRACT

Thiadiazol is a heterocyclic compound which is still developed until now on, because it has wide farmalogical spectrum that highly potential for drug development. Thiadiazole derivatives that used in this study is 2-amino-5-aryl-1,3,4-thiadiazole. One of the benefit from 2-amino5-aryl-1,3,4-thiadiazole is used for anti-bacteri, anti-inflammatory, and analgesic. The purpose of this study is to validate twelve semi-empirical methods. Validation is performed by selecting one of twelve methods in semi-empirical methods that suitable for 2-amino-5-aryl-1,3,4-thiadiazole. Variation in this study was infra red spectrum (IR), and nuclear magnetic resonance spectrum (NMR), and then predicted residual of sum square (PRESS) to find out the most suitable method for 2-amino-5-aryl-1,3,4-thiadiazol. The results showed that parameterized model 3 (PM3) is the most suitable approach for 2-amino-5-aryl-1,3,4-thiadiazole, based from the smallest value from PRESS infra red spectrum was $60.435 \cdot 10^3$, and PRESS value from nuclear magnetic resonance spectrum was 9.314.

Keywords : *semiempirical, thiadiazole, IR, NMR, PM3.*

