

PERSETUJUAN PEMBIMBING

Skripsi yang berjudul “**In Silico Screening senyawa turunan Pirazolin tersubstitusi 1-N dari Thiosemcarbazone sebagai agen anti amuba**”

Oleh
Ismail Sabihi

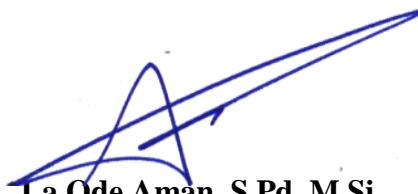
Telah diperiksa dan disetujui untuk diuji

Pembimbing I



Dr. Akram La Kilo, M.Si
NIP. 19770411 200312 1 001

Pembimbing II



La Ode Aman, S.Pd, M.Si
NIP. 19770421 200604 1 002

Mengetahui,
Ketua Jurusan Kimia



Dr. Akram La Kilo, M.Si
NIP. 19770411 200312 1 001

LEMBAR PENGESAHAN

Skripsi yang berjudul: In Silico Screening senyawa turunan Pirazolin tersubstitusi 1-N dari Thiosemcarbazone sebagai agen anti amuba

Oleh: Ismail Sabihi

Telah dipertahankan di depan dewan Penguji

Hari/Tanggal : Selasa, 18 Agustus 2015

Waktu : 08.00 – 09.00 WITA

Penguji:


1. **Drs. Mardjan Papatungan, M.Si**
NIP. 19600215 198803 1 001

1.....

2. **La Alio, S.Pd, M.Si**
NIP. 19750427 200212 1 002

2.....

3. **Rakhmawaty A. Asui, S.Pd, M.Si**
NIP. 19820227 200812 2 002

3.....

4. **Dr. Akram La Kilo, M.Si**
NIP. 19770411 200312 1 001

4.....

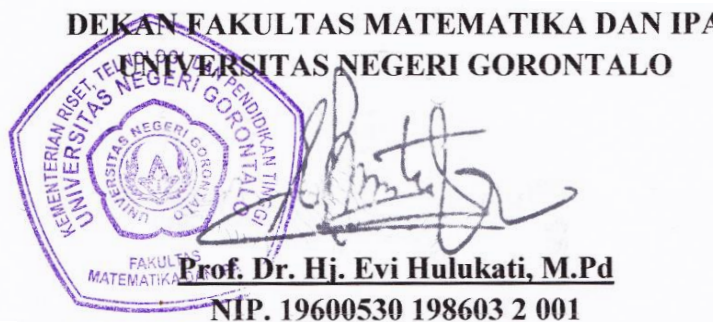
5. **La Ode Aman, S.Pd, M.Si**
NIP. 19770421 200604 1 002

5.....

Gorontalo, September 2015

Mengetahui

**DEKAN FAKULTAS MATEMATIKA DAN IPA
UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO**


Prof. Dr. Hj. Evi Hulukati, M.Pd
NIP. 19600530 198603 2 001

ABSTRAK

Ismail, Sabihi. 2015. *In-Silico Screening senyawa turunan Pirazolin tersubstitusi 1-N dari thiosemicarbazone sebagai agen anti amuba.* Skripsi, Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Gorontalo. Pembimbing I Dr. Akram La Kilo, M.Si dan Pembimbing II La Ode Aman, M.Si. Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari Hubungan kuantitatif antara struktur molekul dan aktivitas biologis (HKSA) senyawa turunan Pirazolin, merancang senyawa baru yang lebih potensial sebagai anti amuba dan mempelajari interaksi senyawa baru anti amuba dengan makromolekul target obat melalui studi *Molecular Docking*. Penelitian ini bersifat teoritis eksploratif dengan menggunakan metode kimia komputasi. Obyek penelitian adalah 21 senyawa turunan pirazolin tersubstitusi 1-N dari thiosemicarbazone beserta nilai aktivitas biologis (IC₅₀) anti amuba. Data penelitian diperoleh dari hasil perhitungan kimia kuantum dengan bantuan perangkat lunak kimia komputasi dan analisis statistik *multilinier regresion* (MLR). Persamaan HKSA yang diperoleh adalah $\text{Log IC}_{50} = 0,869 + (0,081 \times \text{TPSA}) + (0,018 \times \text{HF}) + (0,527 \times \text{E-HOMO}) + (3,378 \times \text{E-LUMO}) + (-16,938 \times \text{Glob}) + (0,234 \times \text{LogP})$, dengan parameter statistik $n = 21$; $R^2 = 0,933$; $\text{SEE} = 0,14558$; $F_{\text{Hitung}}/F_{\text{Tabel}} = 8,607$; $\text{PRESS} = 0,491$. Persamaan ini digunakan sebagai dasar untuk merancang dan memprediksi senyawa anti amuba baru turunan Pirazolin. Perancangan senyawa baru dengan metode Topliss dan menggunakan dua senyawa penuntun (senyawa 15 dan senyawa 21) menghasilkan 18 senyawa baru, 5 diantaranya merupakan senyawa yang memiliki aktivitas yang lebih baik dari senyawa penuntun. Studi *molecular docking* menunjukkan bahwa semua senyawa anti amuba baru yang memiliki aktivitas terbaik mampu berikatan dengan makromolekul target obat.

Kata Kunci : Kimia komputasi, In Silico, HKSA, MLR, Molecular Docking

ABSTRACT

Ismail Sabihi. 2015. In Silico Screening of 1-N-substituted pyrazoline analogues of thiosemicarbazones as antiamebic agent. Skripsi. Chemistry Department, Mathematics and Natural Sciences Faculty, Gorontalo State University. Supervisor I Dr. Akram La Kilo, M.Si, and Supervisor II La Ode Aman, M.Si.

This Research aims to study about Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) of Pyrazoline analogues, to designing the new potential compounds as antiamebic, and to study the interactions between the new antiamebic compounds with the drugs target macromolecule by molecular docking approach. This research is a theoretical research using computational chemistry method. The object in this research is 21 novel of 1-N-substituted pyrazoline analogues of thiosemicarbazones with their antiamebic biological activity. The data of this research was obtained from quantum chemistry calculation and statistically analysis using multilinear regression (MLR). The QSAR equation who has resulted from this research is $\text{Log IC}_{50} = 0,869 + (0,081 \times \text{TPSA}) + (0,018 \times \text{HF}) + (0,527 \times \text{E-HOMO}) + (3,378 \times \text{E-LUMO}) + (-16,938 \times \text{Glob}) + (0,234 \times \text{LogP})$, with statistic parameters $n = 21$; $R^2 = 0,933$; $\text{SEE} = 0,14558$; $F_{\text{Hitung}}/F_{\text{Tabel}} = 8,607$; $\text{PRESS} = 0,491$. This equation was used as a basic to designing and predicting the new antiamebic compounds of pyrazoline analogues. The result of new compounds design by Topliss method with two lead compounds (compound 15 and compound 21) is eighteen new compounds, five other is the best compounds which have theoretical activity better than lead compounds. Molecular docking studies showing that all of this best compounds have ability to bind to drug target macromolecule.

Keywords: Computational Chemistry, In Silico, QSAR, MLR, Molecular Docking