

Lampiran 1. Data Hasil Perhitungan Deskriptor

Senyawa	IC50	Log P	Log S	HOMO	LUMO	Eele	Ethermal	Sentropi	Hentalpi	Etetal	momen dipol	HF	MR	CMA	indeks balaban	mol topologi index	Log IC50 eksperimen	Log IC50 Prediksi
1	12,9	0,965	-1,30742	-0,21693	-0,04969	-635,33095	192,816	124,249	-635,314437	-635,622	1,6032	-483,94	55,074	214,905	53976	2114	1,11058971	1,2824837
2	16	1,393	-1,64005	-0,21693	-0,04955	-674,609572	211,659	131,548	-674,591742	-674,929	1,6088	-504,58	59,822	234,001	76585	2626	1,204119983	1,3611737
3	35,1	0,932	-1,71209	-0,22107	-0,11674	-593,709277	143,999	109,158	-593,695827	-593,926	2,5545	-340,81	52,749	188,522	37861	1710	1,545307116	1,7689033
4	13,4	-0,059	-0,65	-0,27067	-0,13572	-420,541012	76,355	86,579	-420,532327	-420,654	0,764	-284,46	35,618	127,53	6756	646	1,127104798	1,0052603
5	5,6	-0,706	-1,21443	-0,21441	-0,1137	-554,402555	124,951	107,668	-554,390037	-554,59	2,953	-269,68	49,312	173,186	26687	1412	0,748188027	1,1245359
6	35,6	-0,706	-1,2097	-0,21744	-0,11583	-554,40355	124,931	104,414	-554,391334	-554,591	3,6073	-269,68	49,312	173,233	26272	1389	1,551449998	1,1199616
7	32	0,74	-3,1229	-0,22086	-0,12513	-806,00142	137,306	122,58	-805,986024	-806,205	0,8698	-337,35	65,792	215,352	109560	3862	1,505149978	1,5211554
8	3,6	-0,196	-2,41124	-0,22793	-0,12612	-3164,688737	139,311	122,505	-3164,673135	-3164,896	3,5114	-325,95	60,359	205,278	52082	1902	0,556302501	0,9026387
9	13,5	1,508	-1,83998	-0,26293	-0,12933	-577,648136	151,243	111,151	-577,634056	-577,876	0,2113	-387,24	53,6	190,372	38208	1762	1,130333768	1,3644847
10	6	1,586	-2,97058	-0,27971	-0,14747	-1496,791777	140,548	132,048	-1496,775032	-1496,999	0,7128	-441,66	63,182	214,506	70979	2179	0,77815125	0,8291649
11	10	1,295	-1,72237	-0,26729	-0,13477	-538,362751	132,505	103,305	-538,399428	-538,562	0,9857	-355,13	49,242	172,03	26141	1408	1,00000000	1,3754561
12	51,2	2,81	-2,904	-0,26012	-0,12869	-695,470438	207,315	128,146	-695,452528	-695,783	0,0005	-457,91	67,224	235,004	103502	3172	1,709269961	1,6935988
13	5,2	0,0316	-0,77535	-0,26484	-0,13089	-459,824551	94,424	91,559	-459,814878	-459,966	1,1342	-316,57	39,975	145,744	10919	848	0,716003344	0,9810664
14	37,4	2,726	-2,90404	-0,25941	-0,12893	-695,467717	207,409	127,855	-695,449948	-695,781	1,5532	-457,91	67,224	234,69	99543	3044	1,572871602	1,6590019
15	54,2	3,91	-3,8538	-0,25323	-0,1207	-813,28055	263,878	151,02	-813,258212	-813,679	1,0981	-513,3	80,783	274,227	228760	4994	1,733999287	1,9247897
16	56,5	4,912	-4,54753	-0,25529	-0,12703	-931,076196	320,002	166,912	-931,129457	-931,561	0,4331	-599,25	94,474	291,221	464914	7576	1,752048448	1,9943991

Keterangan :



: Parameter Hidrofobik



: Parameter Elektronik



: Parameter Temodinamika



: Parameter Sterik

Lampiran 2. Koefisien Validasi LOO (q^2)

Senyaw a	LOG IC50(y)	Konstanta	Log P		HOMO		HF		Sentropi		Ethermal		y'	y-y'	(y-y') ²	y rata	(y-y rata)	(y-y rata) ²	q ²
			Koefisien	Nilai	Koefisien	Nilai	Koefisien	Nilai	Koefisien	Nilai	Koefisien	Nilai							
1	1,11058971	7,336	0,776	0,965	19,493	-0,21693	-0,0000985	-483,94	-0,006	124,249	-0,011	192,816	1,2824837	-0,17189399	0,029547544	1,252630287	-0,142040577	0,020175525	0,949
2	1,204119983	7,329	0,767	1,393	19,45	-0,21693	-0,0000481	-504,58	-0,006	131,548	-0,011	211,659	1,3611737	-0,157053717	0,02466587	1,167200309	0,036919674	0,001363062	
3	1,545307116	8,822	0,852	0,932	22,865	-0,22107	0,001	-340,81	-0,011	109,158	-0,01	143,999	1,7689033	-0,223596184	0,049995253	1,074575695	0,470731421	0,221588071	
4	0,748188027	6,823	0,841	-0,706	19,84	-0,21441	-0,002	-269,68	0,001	107,668	-0,017	124,931	1,1245359	-0,376347873	0,141637722	0,955705917	-0,20751789	0,043063675	
5	1,505159978	7,173	0,684	0,740	17,352	-0,22086	0,001	-337,35	-0,005	122,580	-0,013	137,306	1,5211554	-0,015995422	0,000255854	0,898152991	0,607006987	0,368457482	
6	0,556302501	6,745	0,731	-0,196	18,221	-0,22793	-0,00001057	-325,95	-0,002	122,505	-0,011	139,311	0,9026387	-0,346336199	0,119948763	0,782371455	-0,226068954	0,051107172	
7	1,130333768	7,296	0,768	1,508	19,297	-0,26293	-0,00004954	-387,24	-0,006	111,151	-0,011	151,243	1,3644847	-0,234150932	0,054826659	0,739578955	0,390754813	0,152689324	
8	1,00000000	7,349	0,779	1,295	18,809	-0,26729	-0,00002774	-355,13	-0,007	103,305	-0,011	132,505	1,3754561	-0,3754561	0,140967283	0,652630203	0,347369797	0,120665776	
9	1,709269961	7,226	0,748	2,81	19,482	-0,26012	-0,00004916	-457,91	-0,005	128,146	-0,011	207,315	1,6935988	0,015671161	0,000245585	0,575707126	1,133562835	1,2849647	
10	0,716003344	7,416	0,774	0,0316	19,77	-0,26484	0,00004475	-316,57	-0,011	91,559	-0,006	94,424	0,9810664	-0,265063056	0,070258424	0,444224822	0,271778522	0,073863565	
11	1,572871602	7,295	0,763	2,726	19,559	-0,25941	-0,00005635	-457,91	-0,005	127,855	-0,011	207,409	1,6590019	-0,086130298	0,007418428	0,389147641	1,183723961	1,401202415	
12	1,733999287	7,319	0,773	3,91	19,421	-0,25323	0,00007123	-513,3	-0,005	151,02	-0,011	263,878	1,9247897	-0,190790413	0,036400982	0,268157518	1,465841769	2,148692092	
13	1,752048448	7,084	0,752	4,912	18,743	-0,25529	0	-599,25	-0,009	166,912	-0,005	320,002	1,9943991	-0,242350652	0,058733839	0,134772958	1,61727549	2,615580012	
															0,676168366				3,739140767

Parameter
 $q^2 \geq 0,50$

Lampiran 3. Data Perhitungan 10 substitusi untuk senyawa baru

Senyawa	Substituen	Konstanta	Log P	HOMO	HF	Ethermal	Sentropi	Log P	HOMO	HF	Ethermal	Sentropi	Log IC50 Prediksi	IC50 Prediksi
TKD1	3-Cl	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,049	2,21912	-0,277527	-375,48	122,156	123,998	-2,549304499	0,00282290
TKD2	3-NO2	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,049	2,20886	-0,28701	-520,86	130,012	132,693	-3,173008291	0,000671416
TKD3	3-N(CH ₃) ₂	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,049	2,23834	-0,21638	-333,49	176,400	134,457	-1,914277502	0,012182109
TKD4	3-F	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,049	1,7584	-0,2761	-555,85	122,812	122,039	-2,777263048	0,001670079
TKD5	3-CF3	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,049	2,51618	-0,28343	-977,46	132,309	136,389	-3,043707401	0,000904258
TKD6	3-OCH3	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,049	1,91644	-0,24583	-512,6	149,596	130,988	-2,53391598	0,002924718
TKD7	3-NH2	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,049	1,62961	-0,22793	-325,95	139,311	122,505	-1,983498793	0,010387265
TKD8	3-CN	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,049	1,33129	-0,28361	-215,5	127,491	126,573	-3,483321735	0,000328608
TKD9	3-COCH3	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,049	1,44504	-0,26249	-513,6	153,074	136,57	-3,49651871	0,000318773
TKD10	3-OH	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,052	2,03754	-0,25842	-511,97	130,699	122,448	-2,61544361	0,002424133
	INDUK	7,329	0,768	19,423	-1,57E-05	-0,001	-0,052	2,39261	-0,27016	-333,41	122,097	126,072	-2,753416334	0,001764346

Keterangan :



: Nilai Deskriptor Persamaan HKSA



: Nilai Deskriptor Optimasi Senyawa Baru

Lampiran 4. Senyawa Uji dan Protein 6IAR

No	Kompleks	ΔG (kkal/mol)	Konstanta Inhibisi (μM)	Jarak (Å)	Interaksi	Residu Asam Amino
1	6IAR-2-bromo-5-chloro-6-isopropyl-3-methylcyclohexa-2,5-diene-1,4-dione	-6.43	19.22	4,7 4,2 3,7 5,4 4,5 4,2 4,7 5,2 5,3 5,2	Hidrofobik π - π bentuk T : PHE404 : Lig Hidrofobik alkil : ALA350 : Lig-C Lig-C : LEU349 Lig-C : LEU391 Lig-C : LEU428 Lig-C : MET388 Hidrofobik π -alkil : PHE404 : Lig-C Lig : A:LEU346 Lig : A:LEU387 Lig : A:LEU391	ARG A: 394 LEU A: 387 GLU A: 353 LEU A: 349 ALA A: 350 LEU A: 346 PHE A: 404 LEU A:391 LEU A: 428 MET A: 388

2	6IAR-2-bromo-6-isopropyl-3-methyl-5-nitrocyclohexa-2,5-diene-1,4-dione	-7.02	7.20	1,9 2,9 1,8 3,9 4,7 3,1 3,3 4,7 4,1 4,3 4,3 3,9 3,7 4,7 5,2	Ikatan Hidrogen : HH12 (ARG394) : Lig-O Lig-O : (O) LEU387 Lig-H : (OE2) GLU353 Hidropobik π -sigma : (CD2) LEU391 : Lig Hidropobik π - π bentuk T : PHE404 : Lig Hidrofobik alkil : ALA350 : Lig-C Lig-C : MET388 Lig-C : LEU391 Lig-C : LEU428 Lig-C : LEU349 Lig-C : LEU387 Lig-C : LEU346 Lig-C : LEU349 Hidrofobik π -alkil : PHE404 : Lig-C Lig : LEU387	ARG A: 394 LEU A: 387 GLU A: 353 LEU A: 346 LEU A: 349 ALA A: 350 PHE A: 404 MET A: 388 LEU A: 391 LEU A: 428
3	6IAR-2-bromo-5-(dimethylamino)-6-isopropyl-3-methylcyclohexa-2,5	-6.43	19.26	3,2	Halogen (Cl, Br, I) : (O)LEU387 : Lig-:Br Hidrofobik π - π bentuk T :	GLU A: 353 LEU A: 349 ALA A: 350 LEU A: 346

	-diene-1,4-dione			4,8 4,2 3,7 5,3 4,6 5,0 4,3 4,6 5,3 5,2 5,3	PHE404 : Lig Hidrofobik alkil : A:ALA350 : Lig-C Lig-C : A:LEU349 Lig-C : A:LEU391 Lig-C : A:LEU428 Lig-C : A:LEU384 Lig-C : A:MET388 Hidrofobik π -alkil : A:PHE404 : Lig-C Lig : LEU346 Lig : LEU387 Lig : LEU391	LEU A: 391 MET A: 421 MET A: 388 LEU A: 525 PHE A: 425 LEU A: 428 ILE A: 424 LEU A: 384 PHE A: 404 ARG A: 394 LEU A: 387
4	6IAR-2-bromo-5-fluoro-6-isopropyl-3-methylcyclohexa-2,5-diene-1,4-dione	-6.69	12.45	1,9 3,1 3,2 3,5 3,2 5,0	Ikatan Hidrogen : HN (VAL534) : Lig-O Ikatan Karbon Hidrogen : CA (VAL533) : Lig-O Halogen (Cl, Br, I) : O (ASN532) : Lig-Br Halogen Flour (F) : C (ALA350) : Lig-F Elektrostatik : OD1 (ASP351) : Lig Hidrofobik π -amida : C,O (VAL534) ; N	PRO A : 535 ASP A: 351 LEU A: 354 LEU A: 539 ASN A: 532 VAL A: 534 VAL A: 533 THR A: 347 LEU A: 525 TRP A: 383 LEU A: 384 LEU A: 387 ALA A: 350

				3,2 3,7 4,0 3,9 5,4 5,1 4,4 4,3 4,5	(PRO535) : Lig Hidrofobik alkil : ALA350 : Lig-C ALA350 : Lig-C Lig-C : LEU354 Lig-C : PRO535 Lig-C : LEU539 Lig-C : LEU525 Hidrofobik π -alkil : TRP383 : Lig-C Lig : ALA350 Lig : PRO535	
5	6IAR-2-bromo-6-isopropyl-3-methyl-5-(trifluoromethyl)cyclohexa-2,5-diene-1,4-dione	-6.50	17.15	3,2 4,7 4,2 3,7 4,9 4,9 4,3 4,5 5,4 5,2	Halogen (Cr, Br, I) : O (LEU387) : Lig-Br Hidrofobik π - π bentuk T : PHE404 : Lig Hidrofobik alkil : ALA350 : Lig-C Lig-C : LEU349 Lig-C : LEU428 Lig-C : LEU384 Lig-C : MET388 Hidrofobik π -alkil : PHE404 : Lig-C PHE425 : Lig-C Lig : LEU346	LEU A: 391 MET A: 388 PHE A: 425 LEU A: 428 MET A: 421 ILE A: 424 LEU A: 384 PHE A: 404 ARG A: 394 LEU A: 387 GLU A: 353 LEU A: 349 LEU A: 346 ALA A: 350

				5,2 5,3	Lig : LEU387 Lig : LEU391	
6	2-6IAR-bromo-6-isopropyl-5-methoxy-3-methylcyclohexa-2,5-diene-1,4-dione	-6.68	12.70	1,8 2,9 2,8 4,8 3,5 4,5 4,3 4,9 3,8 4,4 4,7 4,8 5,4 4,4	Ikatan Hidrogen Konvensional : HN (VAL534) : Lig-O Ikatan Hidrogen Karbon : Lig-C : O (ALA350) Elektrostatik π -anion OD1 (ASP351) : Lig Hidrofobik bentuk π -amida : C,O (VAL534) ; N (PRO535) : Lig Hidrofobik alkil : ALA350 : Lig-C Lig-C : A:LEU354 Lig-C : A:PRO535 Lig-C : A:LEU539 Lig-C : A:LEU525 Lig-C : A:VAL533 Hidrofobik π -alkil TRP383 : Lig-C Lig : ALA350 Lig : LEU354 Lig : PRO535	LEU A: 354 ASP A: 351 PRO A: 535 LEU A: 539 ASN A: 532 TRP A: 383 VAL A: 534 LEU A: 525 THR A: 347 ALA A: 350 LEU A: 387
7	6IAR-2-amino-5-	-6.15	31.08		Ikatan Hidrogen :	ASP A: 351

	bromo-3-isopropyl-6-methylcyclohexa-2,5-diene-1,4-dione			1,8 2,5 3,0 4,8 3,3 4,2 4,0 5,0 3,7 4,3 5,0 4,6 5,4 4,4	HN (VAL534) : Lig-O Lig-H : O (ALA350) Elektrostatik π -anion : OD1 (ASP351) : Lig Hidrofobik bentuk π -amida : C,O (VAL534) ; N (PRO535) : Lig Hidrofobik alkil : ALA350 : Lig-C Lig-C : LEU354 Lig-C : PRO535 Lig-C : LEU539 Lig-C : LEU525 Lig-C : VAL533 Hidrofobik π -alkil TRP383 : Lig-C Lig : ALA350 Lig : LEU354 Lig : PRO535	LEU A: 539 LEU A: 354 LEU A: 387 ALA A: 350 LEU A: 525 VAL A: 533 TRP A: 383 THR A: 347 VAL A: 534 ASN A: 532 PRO A: 535
8	6IAR-4-bromo-2-isopropyl-5-methyl-3,6-dioxocyclohexa-1,4-diene-1-carbonitrile	-7.30	4.45 μ M	2,0 4,7	Ikatan Hidrogen : HH12 (ARG394) : Lig-N Hidrofobik π - π bentuk T : PHE404 : Lig	MET A: 388 LEU A: 428 PHE A: 404 LEU A: 391 LEU A: 346 LEU A: 387

				3,2 3,5 5,0 4,2 4,4 4,2 4,0 3,7 4,7 5,3 4,7	Hidrofobik alkil : ALA350 : Lig-C Lig-C : MET388 Lig-C : LEU391 Lig-C : LEU428 Lig-C : LEU349 Lig-C : LEU387 Lig-C : LEU346 Lig-C : LEU349 Hidrofobik π -alkil : PHE404 : Lig-C Lig : LEU387 Lig : LEU391	LEU A: 349 ALA A: 350 GLU A: 353 ARG A: 394
9	6IAR-3-acetyl-5-bromo-3-isopropyl-6-methylcyclohexa-2,5-diene-1,4-dione	-6.77	10.85	2,1 3,2 4,8 3,3 3,4 5,4 4,4	Ikatan Hidrogen : HH12 (ARG394) : Lig-O Ikatan Hidrogen Karbon : CA (MET388) : Lig-O Hidrofobik π - π berntuk T : PHE404 : Lig Hidrofobik alkil : A:ALA350 : Lig-C Lig-C : MET388 Lig-C : LEU391 Lig-C : LEU428	MET A: 388 LEU A: 428 LUE A: 391 ARG A: 394 LEU A: 346 LEU A: 349 GLU A: 353 LEU A: 387 ALA A: 350 PHE A: 404 LEU A: 384

				4,3	Lig-C : LEU349	
				4,3	Lig-C : LEU387	
				3,7	Lig-C : LEU346	
				3,9	Lig-C : LEU349	
					Hidrofobik π -alkil :	
				4,7	PHE404 : Lig-C	
				5,4	Lig : A:LEU387	
				5,0	Lig : A:LEU391	

10	6IAR-2-bromo-5-hydroxy-6-isopropyl-3-methylcyclohexa-2,5-diene-1,4-dione	-6.61	14.34	2,1	Ikatan Hidrogen : Lig-H : O (ASN532)	ASN A: 532
					Ikatan Karbon	LEU A: 354
				3,4	Hidrogen : CA (VAL533) : Lig-O	PRO A: 535
					Elektrostatik π -anion :	ASP A: 351
				3,2	OD1 (ASP351) : Lig	LEU A: 539
					Hidrogen π -donor :	VAL A: 534
				3,0	HN (VAL534): Lig	ALA A: 350
					Hidrofobik π -amida :	LEU A: 387
				5,0	C,O (VAL534); N	TRP A: 383
					(PRO535) : Lig	LEU A: 525
				3,2	Hidrofobik alkil :	LEU A: 346
				4,7	ALA350 : Lig-C	THR A: 347
				3,7	Lig-C : LEU354	VAL A: 533
				4,3	Lig-C : PRO535	
				3,5	Lig-C : LEU525	
				4,4	Lig-C : ALA350	
				5,3	Hidrofobik π -alkil :	
				5,1	Lig : ALA350	
					Lig : VAL533	
					Lig : PRO535	

Lampiran 5. Perbandingan Interaksi Ikatan Hidrogen pada ligan alami dengan ligan uji



