

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui aktivitas senyawa 4-(1-benzoil-2-okso-1,2-dihidro-indol-3-ilideamino)-Benzena sulfoamida dan turunannya sebagai anti-kanker atau IC_{50} dengan menggunakan teori QSAR (*Quantitative Structure Activity Relationship*) metode Hansch. Kajian ini dimaksudkan untuk membanding hasil secara eksperimen dan komputasi. Penelitian ini menggunakan metode komputasi dengan melibatkan program HyperChem untuk membuat dan optimasi model molekul turunan. Dari optimasi molekul, didapatkan nilai-nilai deskriptor QSAR, kemudian deskriptor tersebut dipilah-pilah untuk dijadikan sebuah persamaan QSAR melalui bantuan regresi linier. Hasil yang telah dilakukan didapatkan nilai r^2 *training sets* untuk mendapatkan persamaan QSAR terdapat enam deskriptor yaitu, Log P, total energi, Luas Permukaan, LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*), HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*), dan dipol. Kemudian dari persamaan QSAR didapatkan nilai $1/\text{Log } IC_{50}$ dari lima senyawa turunan yang digunakan sebagai test dan korelasi antara metode komputasi dan eksperimen sebesar 0,6040. Berdasarkan kajian tersebut, kedua metode memberikan hasil indikasi sama yaitu, jenis substituen yang berpengaruh pada aktivitas anti-kanker senyawa 4-(1-benzoil-2-okso-1,2-dihidro-indol-3-ilideamino) Benzenasulfonamida

Kata Kunci : QSAR, IC_{50} , benzena sulfoamida, deskriptor