

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN.....	ii
SURAT PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI.....	iii
SURAT PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA ILMIAH.....	iv
KATA PENGANTAR.....	v
RINGKASAN.....	vii
ABSTRACT.....	ix
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR TABEL.....	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiv
DAFTAR LAMPIRAN.....	xvii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	7
1.3 Tujuan Penelitian.....	7
1.4 Manfaat Penelitian.....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	8
2.1 Tinjauan tentang Nyeri.....	8
2.2 Tinjauan tentang Analgetika-Antipiretika.....	12
2.3 Tinjauan tentang Bahan Dalam Penelitian	13
2.3.1 <i>P</i> -aminofenol.....	13
2.3.2 Parasetamol	14
2.3.3 4-tercier-butylbenzoil klorida.....	15
2.4 Tinjauan tentang Sintesis <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -Aminofenol	15
2.5 Tinjauan tentang Uji Kemurnian.....	17

2.5.1 Uji Jarak Lebur	17
2.5.2 Kromatografi Lapis Tipis (KLT).....	17
2.6 Tinjauan tentang Identifikasi Struktur.....	18
2.6.1 Spektrofotometer UV-Vis	18
2.6.2 Spektrofotometer FTIR (<i>Fourier-Transform InfraRed</i>).....	18
2.6.3 Spektrometer Resonansi Magnet Inti (¹ H-NMR)	19
2.7 Tinjauan tentang Uji <i>In Silico</i>	20
2.8 Tinjauan tentang Molegro <i>Virtual Docker</i>	21
BAB III KERANGKA KONSEPTUAL.....	23
3.1 Kerangka Konseptual	23
3.2 Hipotesis.....	24
3.3 Skema Kerangka Konseptual	25
BAB IV METODE PENELITIAN	26
4.1 Alat dan Bahan Penelitian	26
4.1.1 Bahan.....	26
4.1.2 Alat	26
4.2 Prosedur Sintesis Senyawa <i>N</i> -(4-tercier)-butilbenzoil- <i>p</i> -aminofenol.....	27
4.3 Kerangka Operasional	28
4.4 Analisis Senyawa <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol	28
4.4.1 Pemeriksaan Organoleptis.....	28
4.4.2 Uji Kemurnian Senyawa Hasil Sintesis	28
4.4.3 Konfirmasi Struktur Senyawa <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol.....	29
4.5 Prosedur Uji Aktivitas Analgesik.....	30
4.5.1 Pembuatan Struktur Senyawa.....	30
4.5.2 Doking Menggunakan Molegro <i>Virtual Docker</i>	31

4.6 Analisis Data Aktivitas Analgesik	32
BAB V HASIL PENELITIAN	34
5.1. Hasil Sintesis Senyawa <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol	34
5.2. Analisis Senyawa Hasil Sintesis	34
5.2.1 Pemeriksaan Organoleptis.....	34
5.2.2 Uji Kemurnian dengan Penentuan Jarak Lebur.....	34
5.2.3 Uji Kemurnian dengan Kromatografi Lapis Tipis (KLT).....	35
5.3. Konfirmasi Struktur Senyawa Hasil Sintesis	36
5.3.1 Konfirmasi Struktur dengan Spektrofotometer UV-VIS	36
5.3.2 Konfirmasi Struktur dengan Spektrofotometer FTIR (<i>Fourier-Transform InfraRed</i>)	37
5.3.3 Konfirmasi Struktur dengan Spektrometer Resonansi Magnet Inti (¹ H-NMR).....	39
5.4. Uji Aktivitas Analgesik.....	41
5.4.1 Pembuatan Struktur Senyawa.....	41
5.4.2 Doking Menggunakan Molegro <i>Virtual Docker</i>	42
5.4.3 Hasil Doking.....	43
5.4.4 Analisis Data <i>Rerank Score</i> dengan Uji ANOVA.....	46
BAB VI PEMBAHASAN.....	47
BAB VII KESIMPULAN DAN SARAN	54
7.1 Kesimpulan.....	54
7.2 Saran.....	54
DAFTAR PUSTAKA	55

DAFTAR TABEL

Tabel V.1	Hasil pemeriksaan organoleptis senyawa hasil sintesis.....	33
Tabel V.2	Hasil pemeriksaan jarak lebur <i>p</i> -aminofenol dan senyawa hasil sintesis	34
Tabel V.3	Hasil pemeriksaan KLT.....	34
Tabel V.4	Karakterisasi gugus fungsi pada spektrum IR <i>p</i> -aminofenol dan <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol	37
Tabel V.5	Karakterisasi spektrum ¹ H-NMR <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol dalam pelarut aseton-d ₆	39
Tabel V.6	Nilai <i>Rerank score</i> hasil doking ligan asam mefenamat, senyawa <i>p</i> -aminofenol, parasetamol dan <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol, terhadap reseptor COX-2 (5IKR).....	43
Tabel V.7	Hasil interaksi senyawa dengan asam-asam amino pada reseptor COX-2.....	46

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1	Struktur <i>p</i> -aminofenol dan urunannya.....	3
Gambar 2.1	Struktur <i>p</i> -aminofenol (ChemDraw 15.0).....	13
Gambar 2.2	Struktur parasetamol (ChemDraw 15.0).....	14
Gambar 2.3	Struktur 4-tercier-butylbenzoil klorida (ChemDraw 5.0).....	15
Gambar 3.1	Skema Kerangka Konseptual.....	25
Gambar 4.1	Reaksi Sintesis <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol.....	27
Gambar 4.2	Kerangka Operasional Penelitian.....	28
Gambar 4.3	(a) Struktur reseptor COX-2 5IKR; (b) Struktur 3D ligan asam mefenamat ID8_601; (c) Struktur 3D senyawa uji <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol; (d) Struktur 3D senyawa pembanding parasetamol dalam program Molegro <i>Virtual Docker</i>	32
Gambar 5.1	Spektrum <i>p</i> -aminofenol dalam etanol.....	36
Gambar 5.2	Spektrum <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol dalam etanol.....	36
Gambar 5.3	Spektrum IR <i>p</i> -aminofenol dalam <i>pellet</i> KBr.....	37
Gambar 5.4	Spektrum IR <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol dalam <i>pellet</i> KBr.....	38
Gambar 5.5	Spektrum ¹ H-NMR <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol dalam pelarut aseton d ₆	40
Gambar 5.6	(a) Struktur 2D <i>p</i> -aminofenol, (b) parasetamol dan (c) <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol (ChemDraw 15.0).....	41

Gambar 5.7	(a) Struktur 3D <i>p</i> -aminofenol, (b) parasetamol dan (c) <i>N</i> -(4-tersier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol (ChemDraw 15.0).....	41
Gambar 5.8	<i>Cavity</i> pada reseptor COX-2 kode PDB: 5IKR.....	42
Gambar 5.9	<i>Cavity</i> 4 pada reseptor COX-2 kode PDB: 5IKR; dan ligan asam mefenamat (ID8_601) yang ada dalam <i>cavity</i> 4.....	43
Gambar 5.10	Ikatan antara <i>p</i> -aminofenol dengan asam-asam amino pada reseptor COX-2 (5IKR) dalam bentuk (a) 2D (b) 3D.....	44
Gambar 5.11	Ikatan antara parasetamol dengan asam-asam amino pada reseptor COX-2 (5IKR) dalam bentuk (a) 2D (b) 3D... ..	44
Gambar 5.12	Ikatan antara <i>N</i> -(4-tersier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol dengan asam-asam amino pada reseptor COX-2 (5IKR) dalam bentuk (a) 2D (b) 3D.....	45
Gambar 5.13	Ikatan antara ligan standar asam mefenamat (ID8_601) dengan asam-asam amino pada reseptor COX-2 (5IKR) dalam bentuk (a) 2D (b) 3D.....	45

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1.	Perhitungan Persentase Hasil Sintesis.....	60
Lampiran 2.	Hasil Eluasi KLT dan Perhitungan Nilai Rf.....	61
Lampiran 3.	Perbesaran Spektrum ¹ H-NMR <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol dalam pelarut aseton-d ₆	63
Lampiran 4.	Perhitungan Konstanta Coupling (<i>J</i>) Spektra ¹ H-NMR <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol.....	64
Lampiran 5.	Hasil Perhitungan ANOVA dan LSD Antara <i>p</i> -aminofenol, Senyawa Kontrol Asam Mefenamat, Senyawa Pembanding Parasetamol dan Senyawa Uji <i>N</i> -(4-tercier-butylbenzoil)- <i>p</i> -aminofenol.....	65
Lampiran 6.	Tabel Statistika Nilai F.....	68