

Kartika, Indah R., 2015, Sintesis Penambahan Gugus Metoksi Pada Senyawa Turunan Calkon Asam-4-(4-sinamoilfenilamino)-4-oksobutanoat Dan Analisis *In Silico* Terhadap Feredoksin NADP⁺ Reduktase *Plasmodium falciparum*, skripsi ini di bawah bimbingan Prof. Dr. Ni Nyoman Tri P., M.Si dan Drs. Hery Suwito, M.Si, Departemen Kimia Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga, Surabaya.

ABSTRAK

Senyawa turunan calkon dengan penambahan gugus metoksi telah disintesis menggunakan reaksi *Claisen-Schmidt* dan reaksi amidasi dengan suksinat anhidrat sebagai inhibitor *Plasmodium falciparum* feredoksin-NADP⁺ reduktase (*PfFNR*). Struktur senyawa hasil sintesis dilakukan uji kemurnian menggunakan Kromatografi lapis tipis (KLT) dan Uji titik leleh. Selain itu, senyawa tersebut dikarakterisasi menggunakan Spektrofotometri FTIR, NMR dan Spektrometri massa (MS). Data yang diperoleh menunjukkan bahwa struktur senyawa ini benar. Analisis *in silico* juga dilakukan untuk melakukan *virtual screening* terhadap senyawa hasil sintesis yang berpotensi sebagai inhibitor terhadap feredoksin-NADP⁺ reduktase *Plasmodium falciparum* (*PfFNR*). Hasil analisis *in silico* menunjukkan bahwa senyawa turunan amida calkon hasil sintesis memiliki energi ikatan dan koefisien inhibisi yang masing-masing sebesar -8,63 dan 0,47 untuk amida 2, -8,55 dan 0,54 untuk amida 5, -9,18 dan 0,18 untuk amida 7. Senyawa turunan calkon tanpa penambahan gugus metoksi, yaitu Asam-4-(4-sinamoilfenilamino)-4-oksobutanoat memiliki energi ikatan dan koefisien inhibisi paling rendah, yaitu masing-masing sebesar -9,18 Kkal/mol dan 0,18 μ M. Interaksi molekular yang terjadi berdasarkan hasil *docking* antara enzim *PfFNR* dengan ligan amida 2 dan amida 7 memiliki jumlah interaksi, yaitu 12 ikatan Van Der Waals, 3 ikatan hidrogen dan 1 interaksi elektrostatik, sedangkan ligan amida 5 memiliki 11 ikatan Van Der Waals, 6 ikatan hidrogen dan 1 interaksi elektrostatik.

Kata Kunci : *PfFNR*, turunan calkon, analisis *in silico*

Kartika, Indah R., 2015, *Synthesized of Addition Methoxy on Chalcone Derivative 4-(4-cinnamoilaminophenyl)-4-oxsobutanoic Acid and It Analysis In Silico of Plasmodium falciparum Ferredoxin-NADP⁺ Reductase*, skripsi ini di bawah bimbingan Prof. Dr. Ni Nyoman Tri P., M.Si dan Drs. Hery Suwito, M.Si, Departemen Kimia Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga, Surabaya.

ABSTRACT

Chalcone derivatives with various addition of methoxy have been synthesized using Claisen-Schmidt reaction and amidation reaction with succinate anhydrate as inhibitor of Plasmodium falciparum ferredoxin-NADP⁺ reductase (PfFNR). The compounds were using using thin layer chromatography (TLC) and a melting point apparatus to know the purity. The compound structures were characterized by Fourier transport infra red (FTIR), nuclear magnetic resonance (NMR) and mass spectrometry (MS). The data obtained indicate that these structures of these compounds are correct. This research using in silico analysis to do virtual screening to identify potent inhibitors against Plasmodium falciparum ferredoxin-NADP⁺ reductase (PfFNR). The result of this analysis showed chalcone derivatives with various addition of methoxy has energy binding and coefficient of inhibition. However, chalcone derivatives wihtout addition of a methoxy, namely 4-(4-cinnamoilaminophenyl)-4-oxsobutanoic acid has the lowest energy binding and coefficient of inhibition that are -9,18 Kkal/mol 0,18 μ M. Molecular interactions that occur between ligand and PfFNR enzyme are electrostatic interactions, hydrogen bonding and Van Der Waals bonding. Molecular interactions that occur based on the results of docking between the enzyme PfFNR with amide 2 and amide ligand 7 has a number of interactions, which are 12 Van Der Waals bonds, 3 bonds hidrgon and 1 electrostatic interactions, whereas the amide ligand 5 has 11 Van Der Waals bonds, 6 hydrogen bonds and 1 electrostatic interactions.

Keywords: *PfFNR, chalcone derivative, in silico analysis*