

## DAFTAR ISI

	<b>Halaman</b>
<b>JUDUL</b> .....	i
<b>LEMBAR PERNYATAAN</b> .....	ii
<b>LEMBAR PENGESAHAN</b> .....	iii
<b>PEDOMAN PENGGUNAAN SKRIPSI</b> .....	iv
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	v
<b>ABSTRAK</b> .....	vi
<b>ABSTRACT</b> .....	vii
<b>DAFTAR ISI</b> .....	viii
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	xi
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	xii
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	xiii
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	
1.1 Latar Belakang Masalah.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	5
1.3 Tujuan dan Manfaat Penelitian.....	5
1.3.1 Tujuan penelitian.....	5
1.3.2 Manfaat penelitian.....	6
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b>	
2.1 Malaria.....	7
2.2 Antimalari.....	8
Resistensi antimalaria.....	10
2.3 Calkon.....	11
Sintesis calkon.....	13
2.4 Apikoplas.....	13
2.5 Analisis <i>in silico</i> .....	15
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	
3.1 Tempat dan Waktu Penelitian.....	17
3.2 Alat dan Bahan Penelitian.....	17
3.2.1 Alat-alat penelitian.....	17
3.2.2 Bahan-bahan penelitian.....	18
3.3 Diagram Alir Penelitian.....	19
3.4 Prosedur Penelitian.....	19
3.4.1 Prosedur umum sintesis senyawa turunan amino calkon dengan reaksi kondensasi Claisen-Schmidt.....	19
3.4.2 Prosedur umum sintesis senyawa turunan amida calkon dengan reaksi amidasi.....	20
3.4.3 Uji kemurnian senyawa hasil sintesis.....	20
3.4.3.1 Uji kromatografi lapis tipis.....	20
3.4.3.2 Uji titik leleh.....	21

3.4.4	Karakterisasi senyawa hasil sintesis.....	21
3.4.4.1	Uji FT-IR.....	21
3.4.4.2	Uji MS.....	21
3.4.4.3	Uji <sup>1</sup> H dan <sup>13</sup> C NMR.....	22
3.4.5	Analisis <i>in silico</i> interaksi molekul target dan PfFNR dengan program <i>Autodock4</i> .....	22
3.4.5.1	Validasi <i>docking</i> .....	22
3.4.5.1.1	Persiapan ligan.....	22
3.4.5.1.2	Persiapan makromolekul .....	23
3.4.5.1.3	<i>Autogrid</i> .....	23
3.4.5.1.4	<i>Autodock</i> .....	24
3.4.5.5.5	Analisis hasil <i>redocking</i> .....	24
3.4.5.1	<i>Docking</i> hasil sintesis .....	25
3.4.5.1.1	Persiapan ligan.....	25
3.4.5.1.2	Persiapan makromolekul .....	25
3.4.5.1.3	<i>Autogrid</i> .....	26
3.4.5.1.4	<i>Autodock</i> .....	27
3.4.5.5.5	Analisis hasil <i>docking</i> .....	27
 <b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>		
4.1	Sintesis senyawa turunan amino calkon dengan reaksi kondensasi <i>Claisen-Schmidt</i> .....	29
4.1.1	Sintesis senyawa 1-(4-amino-fenil)-3-(3-metoksi-fenil)prop-2-en-1-on (Amina2).....	30
4.1.2	Sintesis senyawa 1-(4-amino-fenil)-3-(2,4-dimetoksi-fenil)prop-2-en-1-on (Amina5).....	30
4.1.3	Sintesis senyawa 1-(4-amino-fenil)-3-fenil-prop-2-en-1-on (Amina7).....	31
4.2	Sintesis senyawa turunan amida calkon dengan reaksi amidasi.....	31
4.2.1	Sintesis senyawa asam-4-(4-(3-(3-metoksifenil)akriloil)fenilamino)-4-oksobutanoat (amida 2).....	33
4.2.2	Sintesis senyawa asam-4-(4-(3-(2,4-dimetoksifenil)akriloil)fenilamino)-4-oksobutanoat (amida 5).....	36
4.2.3	Sintesis senyawa asam-4-(4-(sinamoilfenilamino)-4-oksobutanoat (amida 7).....	39
4.3	Karakterisasi senyawa hasil sintesis.....	42
4.3.1	Karakterisasi struktur senyawa asam-4-(4-(3-(3-metoksifenil)akriloil)fenilamino)-4-oksobutanoat (amida 2).....	42
4.3.1.1	Spektroskopi FTIR.....	42
4.3.1.2	Spektroskopi massa (MS).....	43
4.3.1.3	<i>Nuclear magnetic resonance</i> (NMR).....	44
4.3.2	Karakterisasi struktur senyawa asam-4-(4-(3-(2,4-dimetoksifenil)akriloil)fenilamino)-4-oksobutanoat (amida 5).....	46

4.3.2.1 Spektroskopi FTIR.....	46
4.3.2.2 Spektroskopi massa (MS).....	47
4.3.2.3 <i>Nuclear magnetic resonance</i> (NMR).....	47
4.3.3 Karakterisasi struktur senyawa asam-4- (4-sinamoilfenilamino)-4-oksobutanoat (amida 7).....	50
4.3.3.1 Spektroskopi FTIR.....	50
4.3.3.2 Spektroskopi massa (MS).....	51
4.3.3.3 <i>Nuclear magnetic resonance</i> (NMR).....	52
4.4 Analisis <i>in silico</i> interaksi molekul target dan <i>PfFNR</i> dengan program <i>Autodock4</i> .....	54
4.4.1 Validasi <i>docking</i> .....	55
4.4.2 Molekular <i>docking</i> .....	57
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	
5.1 Kesimpulan.....	64
5.2 Saran.....	65
<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	66
<b>LAMPIRAN</b>	

## DAFTAR GAMBAR

Nomor	Judul Gambar	Halaman
2.1	Nyamuk Anopheles terinfeksi.....	7
2.2	Siklus hidup parasit malaria.....	7
2.3	Struktur antimalaria.....	10
2.4	Struktur senyawa calkon.....	12
2.5	Persamaan reaksi sintesis calkon <i>Claisen-Schmidt</i> .....	13
2.6	Persamaan reaksi sintesis amida dengan reaksi amidasi.....	14
4.1	Hasil elusidasi senyawa amina.....	32
4.2	Hasil elusidasi senyawa target Amida 2.....	34
4.3	Mekanisme reaksi sintesis amina 2.....	35
4.4	Mekanisme reaksi sintesis amida 2.....	35
4.5	Hasil elusidasi senyawa target Amida 5.....	37
4.6	Mekanisme reaksi sintesis amina 5.....	38
4.7	Mekanisme reaksi sintesis amida 5.....	39
4.8	Hasil elusidasi senyawa target Amida 7.....	40
4.9	Mekanisme reaksi sintesis amina 7.....	41
4.10	Mekanisme reaksi sintesis amida 7.....	42
4.11	Struktur amida 2 dengan nilai $\delta$ <sup>1</sup> H-NMR.....	45
4.12	Struktur amida 2 dengan nilai $\delta$ <sup>13</sup> C-NMR.....	46
4.13	Struktur amida 5 dengan nilai $\delta$ <sup>1</sup> H-NMR.....	49
4.14	Struktur amida 5 dengan nilai $\delta$ <sup>13</sup> C-NMR.....	50
4.15	Struktur amida 7 dengan nilai $\delta$ <sup>1</sup> H-NMR.....	53
4.16	Struktur amida 7 dengan nilai $\delta$ <sup>13</sup> C-NMR.....	54
4.17	Struktur senyawa ligan asli.....	56
4.18	Perbandingan hasil <i>redocking</i> ligan.....	56

## DAFTAR LAMPIRAN

No.	Judul
1	Perhitungan rendemen senyawa hasil sintesis
2	Hasil FT-IR
3	Hasil HR-ESI-MS
4	Hasil NMR



**DAFTAR TABEL**

Nomor	Judul Tabel	Halaman
4.1	Nilai Rf senyawa hasil sintesis amida 2.....	33
4.2	Nilai Rf senyawa hasil sintesis amida 5.....	36
4.3	Nilai Rf senyawa hasil sintesis amida 7.....	40
4.4	Interaksi ligan hasil <i>redocking</i> .....	57
4.5	Letak ligan pada <i>pokect</i> enzim.....	58
4.6	Interaksi ikatan antara ligan dengan residu aktif.....	60
4.7	Interaksi ikatan hidrogen dan <i>Van Der Waals</i> .....	61

