# DAFTAR ISI

Halaman

**HALAMAN JUDUL** ..... **i**
**LEMBAR PERNYATAAN** ..... **ii**
**LEMBAR PENGESAHAN** ..... **iii**
**LEMBAR PEDOMAN PENGGUNAAN SKRIPSI** ..... **iv**
**KATA PENGANTAR** ..... **v**
**ABSTRAK** ..... **vii**
**ABSTRACT** ..... **viii**
**DAFTAR ISI** ..... **ix**
**DAFTAR TABEL** ..... **xi**
**DAFTAR GAMBAR** ..... **xii**
**DAFTAR LAMPIRAN** ..... **xiv**
**BAB I: PENDAHULUAN** ..... **1**
1.1 Latar Belakang Permasalahan ..... 1
1.2 Rumusan Masalah ..... 8
1.3 Tujuan Penelitian ..... 8
1.4 Manfaat Penelitian ..... 8

**BAB II: TINJAUAN PUSTAKA** ..... **9**
2.1 Inhibitor ..... 9
2.2 Calkon ..... 10
2.3 Bioaktivitas Calkon ..... 11
2.4 Sintesis Calkon ..... 12
2.5 Malaria ..... 12
2.6 Antimalaria ..... 13
2.7 Molekular Docking ..... 15

**BAB III: METODE PENELITIAN** ..... **17**
3.1 Tempat dan Waktu Penelitian ..... 17
3.2 Bahan dan Alat Penelitian ..... 17
3.2.1 Bahan penelitian ..... 17
3.2.2 Alat penelitian ..... 18
3.3 Diagram Alir Penelitian ..... 19
3.4 Tahapan Penelitian ..... 20
3.4.1 Prosedur sintesis senyawa turunan amina calkon ..... 20
3.4.2 Prosedur sintesis senyawa turunan amida calkon ..... 20
3.4.3 Karakterisasi senyawa hasil sintesis ..... 21
3.4.3.1 Uji titik leleh ..... 21
3.4.3.2 Uji Kromatografi Lapis Tipis (KLT) ..... 21
3.4.3.1 Uji spektroskopi FT-IR ..... 22
3.4.3.2 Uji spektroskopi NMR ..... 22

3.4.3.1 Uji spektroskopi MS ..... 22
3.4.4 Eksperimen *docking in silico* interaksi *Pf*FNR-senyawa hasil sintesis dengan program Autodock4 ..... 23
3.4.4.4.1 Persiapan ligan ..... 23
3.4.4.4.2 Persiapan makromolekul ..... 23
3.4.4.4.3 Grid box ..... 24
3.4.4.4.4 Eksperimen *docking* ..... 24
3.4.4.4.5 Analisis hasil *docking* ..... 25

**BAB IV: HASIL DAN PEMBAHASAN…… 26**
4.1 Sintesis senyawa turunan amina calkon ..... 26
4.2 Sintesis senyawa turunan amida calkon ..... 29
4.3 Analisis Spektroskopi ..... 32
4.3.1 Analisis Spektroskopi Inframerah (IR) ..... 32
4.3.2 Analisis Spektroskopi massa (MS) ..... 33
4.3.3 Analisis Spektroskopi resonansi magnetik inti (NMR) .... 35
4.3.3.1 Senyawa **(1)** ..... 38
4.3.3.2 Senyawa **(2)** ..... 40
4.3.3.3 Senyawa **(3)** ..... 42
4.4 Docking Molekular ..... 44
4.4.1 Validasi Docking Molekular ..... 44
4.4.2 Docking menggunakan Autodock4 ..... 46

**BAB V: KESIMPULAN DAN SARAN ..... 54**
5.1 Kesimpulan ..... 54
5.2 Saran ..... 54

**DAFTAR PUSTAKA ..... 55**

**LAMPIRAN**

# DAFTAR TABEL


| Nomor | Judul Tabel | Halaman |
|---|---|---|
| 4.1 | Hasil sintesis senyawa amino calkon | 27 |
| 4.2 | Hasil uji Kromatografi Lapis Tipis (KLT) | 28 |
| 4.3 | Hasil sintesis senyawa amida calkon | 30 |
| 4.4 | Hasil Uji kemurnian senyawa amida calkon | 31 |
| 4.5 | Hasil Uji FTIR senyawa hasil sintesis | 33 |
| 4.6 | Hasil uji HR-ESI MS senyawa hasil sintesis | 35 |
| 4.7 | Data spektrum $^{1}$H-NMR dan $^{13}$C-NMR molekul target **(1)** | 38 |
| 4.8 | Data spektrum $^{1}$H-NMR dan $^{13}$C-NMR molekul target **(2)** | 40 |
| 4.9 | Data spektrum $^{1}$H-NMR dan $^{13}$C-NMR molekul target **(3)** | 42 |
| 4.10 | Hasil analisis *docking* menggunakan *AutoDock 4* | 48 |
| 4.11 | Model Interaksi Ikatan Hidrogen Senyawa Hasil Sintesis dengan Residu Asam Amino | 52 |

# DAFTAR GAMBAR


| Nomor | Judul Gambar | Halaman |
|---|---|---|
| 1.1 | Struktur senyawa molekul target | 5 |
| 1.2 | Retrosintesis senyawa turunan amida calkon | 6 |
| 2.1 | Jenis-jenis inhibitor | 9 |
| 2.2 | Senyawa Calkon | 10 |
| 2.3 | Struktur 2',5'-dihidroksicalkon | 11 |
| 2.4 | Sintesis calkon melalui kondensasi Claisen-Schmidt | 12 |
| 2.5 | Struktur Quinine dan Chloroquine | 13 |
| 2.6 | Struktur Sulfadoxin dan Pyrimethamine | 14 |
| 4.1 | Mekanisme Reaksi Sintesis Amina Calkon | 28 |
| 4.2 | Mekanisme Reaksi Sintesis Amida Calkon | 30 |
| 4.3 | Sistem Penomoran Molekul Target **(3)** | 32 |
| 4.4 | Sistem Penomoran Molekul Target **(1)** | 39 |
| 4.5 | Struktur molekul target **(1)** dengan nilai δ $^{1}$H-NMR | 39 |
| 4.6 | Struktur molekul target **(1)** dengan nilai δ $^{13}$C-NMR | 39 |
| 4.7 | Sistem Penomoran Molekul Target **(2)** | 41 |
| 4.8 | Struktur molekul target **(2)** dengan nilai δ $^{1}$H-NMR | 41 |
| 4.9 | Struktur molekul target **(2)** dengan nilai δ $^{13}$C-NMR | 41 |
| 4.10 | Sistem Penomoran Molekul Target **(3)** | 43 |
| 4.11 | Struktur molekul target **(3)** dengan nilai δ $^{1}$H-NMR | 43 |
| 4.12 | Struktur molekul target **(3)** dengan nilai δ $^{13}$C-NMR | 43 |

4.13 Ligan 2’-P-AMP 45

4.14 Perbandingan hasil *docking* ligan 2’-P-AMP dan referensi PDB 46

4.15 *Pocket* sisi aktif enzim *Pf*FNR 47

# DAFTAR LAMPIRAN


| No. | Judul |
|---|---|
| 1 | Perhitungan Rendemen senyawa hasil sintesis |
| 2 | Spektrum Inframerah (IR) senyawa hasil sintesis |
| 3 | Spektrum spektroskopi massa (MS) senyawa hasil sintesis |
| 4 | Spektrum $^{1}$H-NMR, $^{13}$C-NMR dan HMBC senyawa hasil sintesis |