

SYNTHESIS OF 2,3-EPOXY-1,3-DIPHENYLPROPANE-1-ONE AND 2,3-DIHYDROXY-1,3-DIPHENYLPROPANE-1-ONE FROM BENZALDEHYDE AND THEIR ACTIVITY TESTS AS CANDIDATES FOR ANTI-CANCER AND ANTIMALARIA THROUGH MOLECULAR DOCKING

Ranto Jambi Muhammad Subekti
17/409486/PA/17793

ABSTRACT

In this research, the molecular docking and synthesis of 1,3-diphenyl-2,3-epoxy-1-propanone and 2,3-dihydroxy-1,3-diphenylpropanone compounds have been carried out. This research aims to synthesize and study the activity of 1,3-diphenyl-2,3-epoxy-1-propanone and 2,3-dihydroxy-1,3-diphenylpropanone compounds which have benefits as anticancer and antimalarial compounds. The first stage was an anticancer test on 1,3-diphenyl-2,3-epoxy-1-propanone and an antimalarial test on 2,3-dihydroxy-1,3-diphenylpropanone compounds through molecular anchoring methods. The native ligands used in the molecular docking process for 1J3I, 4YCV, 1WPQ and 3G3M proteins are WRA, KRS, NAD and 5FU, respectively. Molecular docking results show that 1,3-diphenyl-2,3-epoxy-1-propanone compounds can be used as anticancer compounds and 2,3-dihydroxy-1,3-diphenylpropanone compounds can also be used as antimalarial compounds.

The next step was the synthesis of 1,3-diphenylpropanone compound by Claisen Schmidt condensation of benzaldehyde and acetophenone followed by the synthesis of 1,3-diphenyl-2,3-epoxy-1-propanone using the one pot reaction method then the reaction continued with the synthesis of 2,3-dihydroxy-1,3-diphenylpropanone via an epoxy ring opening reaction. The sample of 1,3-diphenyl-2,3-epoxy-1-propanone produced was a yellowish-white solid with a yield of 51% while the sample of 2,3-dihydroxy-1,3-diphenylpropanone produced was a yellowish white solid with a percent yield of 59% yield.

Keywords: anticancer; antimalarial; molecular docking, synthesis

**SINTESIS 1,3-DIFENIL-2,3-EPOKSI-1-PROPANON DAN
1,3-DIFENIL-2,3-DIHIDROKSIPROPANON DARI BENZALDEHIDA
DAN UJI AKTIVITASNYA SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER DAN
ANTIMALARIA MELALUI PENAMBATAN MOLEKUL**

Ranto Jambi Muhammad Subekti
17/409486/PA/17793

INTISARI

Pada penelitian ini telah dilakukan penambatan molekul dan sintesis senyawa 1,3-difenil-2,3-epoksi-1-propanon dan 1,3-difenil-2,3-dihidroksiopropanon. Penelitian ini bertujuan untuk mensintesis dan mempelajari aktivitas senyawa 1,3-difenil-2,3-epoksi-1-propanon dan 1,3-difenil-2,3-dihidroksiopropanon yang memiliki manfaat sebagai senyawa antikanker dan antimalaria. Tahap pertama adalah uji antikanker pada senyawa 1,3-difenil-2,3-epoksi-1-propanon dan uji antimalaria pada senyawa 1,3-difenil-2,3-dihidroksiopropanon melalui metode penambatan molekul. *Native ligand* yang digunakan pada proses penambatan molekul terhadap protein 3G3M, 1WPQ, 1J3I dan 4YCV berturut-turut yaitu 5FU, NAD, WRA dan KRS. Hasil penambatan molekul menunjukkan bahwa senyawa 1,3-difenil-2,3-epoksi-1-propanon dapat digunakan sebagai antikanker dan senyawa 1,3-difenil-2,3-dihidroksiopropanon juga dapat digunakan sebagai senyawa antimalaria.

Tahap selanjutnya adalah sintesis senyawa 1,3-difenilpropanon dengan kondensasi Claisen Schmidt dari benzaldehida dan asetofenon yang dilanjutkan dengan sintesis 1,3-difenil-2,3-epoksi-1-propanon menggunakan metode *one-pot reaction* kemudian reaksi dilanjutkan dengan sintesis senyawa 1,3-difenil-2,3-dihidroksiopropanon melalui reaksi pembukaan cincin epoksi. Sampel 1,3-difenil-2,3-epoksi-1-propanon yang dihasilkan berupa padatan berwarna putih kekuningan dengan persen hasil 51% sedangkan sampel senyawa 1,3-difenil-2,3-dihidroksiopropanon yang dihasilkan berupa padatan putih kekuningan dengan persen hasil 59%.

Kata kunci: antikanker; antimalaria; penambatan molekul; sintesis