



UNIVERSITAS
GADJAH MADA

SINTESIS SENYAWA 4-HIDROKSI-3,4-DIMETOKSIKALKON SERTA PREDIKSI AKTIVITASNYA
SEBAGAI KANDIDAT SENYAWA

ANTIMALARIA MELALUI PENAMBATAN MOLEKUL

Nurul Eka Listiana, Sugeng Triono, S.Si., M.Si.; Prof. Drs. Jumina, Ph.D.

Universitas Gadjah Mada, 2023 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

**SINTESIS SENYAWA 4-HIDROKSI-3,4-DIMETOKSIKALKON SERTA
PREDIKSI AKTIVITASNYA SEBAGAI KANDIDAT SENYAWA
ANTIMALARIA MELALUI PENAMBATAN MOLEKUL**

Nurul Eka Listiana

18/424232/PA/18337

INTISARI

Pada penelitian ini telah dilakukan sintesis dan penambatan molekul senyawa 4-hidroksi-3,4-dimetoksikalkon. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk menyintesis dan mempelajari aktivitas senyawa 4-hidroksi-3,4-dimetoksikalkon sebagai kandidat senyawa antimalaria. Tahap pertama adalah proses sintesis melalui reaksi kondensasi Claisen-Schmidt dengan mereaksikan 4-hidroksiasetofenon dan veratraldehida dengan katalis KOH dalam pelarut etanol menggunakan metode konvensional dan sonokimia menghasilkan senyawa 4-hidroksi-3,4-dimetoksikalkon. Tahap selanjutnya adalah uji aktivitas antimalaria pada senyawa 4-hidroksi-3,4-dimetoksikalkon melalui metode penambatan molekul. Protein yang digunakan pada proses penambatan molekul antara lain 1J3I (*PfDHFR-TS*), 4DP3 (*PfDHFR-TS*), 1CET (*PfLDH*), 1NNU (*PfENR*), 4YCV (*PfLysS*), dan 6I4B (*PfDHODH*).

Hasil sintesis menunjukkan senyawa 4-hidroksi-3,4-dimetoksikalkon berwujud padatan berwarna kuning dengan metode konvensional dan sonokimia dengan waktu reaksi 48 jam dan 2,5 jam serta menghasilkan rendemen berturut-turut yaitu 45,88% dan 48,23%. Hasil penambatan molekul menunjukkan bahwa senyawa 4-hidroksi-3,4-dimetoksikalkon memiliki aktivitas sebagai kandidat senyawa antimalaria.

Kata kunci: antimalaria, kalkon, penambatan molekul.



UNIVERSITAS
GADJAH MADA

SINTESIS SENYAWA 4-HIDROKSI-3,4-DIMETOKSIKALKON SERTA PREDIKSI AKTIVITASNYA
SEBAGAI KANDIDAT SENYAWA

ANTIMALARIA MELALUI PENAMBATAN MOLEKUL

Nurul Eka Listiana, Sugeng Triono, S.Si., M.Si.; Prof. Drs. Jumina, Ph.D.

Universitas Gadjah Mada, 2023 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

**SYNTHESIS OF 4-HYDROXY-3,4-DIMETHOXYCHALCONE
COMPOUND AND THE ACTIVITY PREDICTION AS CANDIDATE
ANTIMALARIAL COMPOUND THROUGH MOLECULAR DOCKING**

Nurul Eka Listiana

18/424232/PA/18337

ABSTRACT

In this research, the synthesis and molecular docking of 4-hydroxy-3,4-dimethoxychalcone compounds has been carried out. This research aims to synthesize and study the activity of 4-hydroxy-3,4-dimethoxychalcone compound as a candidate antimalarial compound. The first step was the synthesis process through Claisen-Schmidt condensation reaction by reacting the 4-hydroxy acetophenone and veratraldehyde with KOH catalyst in ethanol solvent using conventional and sonochemical methods to produce 4-hydroxy-3,4-dimethoxychalcone compounds. The next step was testing the antimalarial activity of the 4-hydroxy-3,4-dimethoxychalcone compound through the molecular docking method. The proteins used in the molecular docking process are 1J3I (*PfDHFR-TS*), 4DP3 (*PfDHFR-TS*), 1CET (*PfLDH*), 1NNU (*PfENR*), 4YCV (*PfLysS*), dan 6I4B (*PfDHODH*).

The synthesis showed that 4-hydroxy-3,4-dimethoxychalcone was a yellow solid using conventional and sonochemical methods with 48 hours and 2.5 hours reaction times, resulting in yields of 45.88% and 48.23%, respectively. The molecular docking results indicate that the 4-hydroxy-3,4-dimethoxychalcone compound has activity as a candidate antimalarial compound.

Keywords: antimalarial, chalcone, molecular docking.