

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PERSETUJUAN.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN	iii
SURAT PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI.....	iii
PRAKATA	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	ix
DAFTAR TABEL.....	xiv
DAFTAR LAMPIRAN	xvi
DAFTAR PUBLIKASI DAN SEMINAR.....	xvii
INTISARI.....	xix
ABSTRACT	xx
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Perumusan Masalah	7
I.3 Kebaruan Penelitian	7
I.3.1 Kebaruan penelitian dari aspek sintesis	8
I.3.2 Kebaruan penelitian dari aspek farmakologi	10
I.3.3 Kebaruan penelitian dari aspek kajian komputasi	10
I.4 Tujuan Penelitian	11
I.5 Manfaat Penelitian	11
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS.....	12
II.1 Tinjauan Pustaka.....	12
II.1.1 Obat antikanker.....	12
II.1.2 Obat antimikroba	14
II.1.3 Obat antimalaria	15
II.1.4 Senyawa turunan xanton.....	17
II.1.5 Senyawa turunan asam lemak.....	20
II.1.6. Senyawa turunan sinamat	22
II.1.7 Hibridisasi struktur senyawa organik	24
II.1.8 Metode kimia komputasi untuk penelitian senyawa obat.....	31
II.2 Perumusan Hipotesis	37
II.2.1 Hipotesis 1	37
II.2.2 Hipotesis 2	38
II.2.3 Hipotesis 3	39
II.2.4 Hipotesis 4	40
II.2.5 Rancangan penelitian.....	41
BAB III METODE PENELITIAN	43
III.1 Bahan dan Alat	43
III.1.1 Bahan.....	43
III.1.2 Alat.....	44

III.2	Prosedur Penelitian.....	45
III.2.1	Sintesis senyawa asam salisilat dari minyak gondopuro.....	45
III.2.2	Sintesis senyawa hidroksixanton.....	45
III.2.3	Sintesis senyawa hibrida xanton-asam lemak	46
III.2.4	Sintesis senyawa hibrida xanton-sinamat.....	46
III.2.5	Uji sitotoksitas secara <i>in vitro</i>	47
III.2.6	Uji aktivitas antikanker secara <i>in vitro</i>	47
III.2.7	Uji aktivitas antimikroba secara <i>in vitro</i>	49
III.2.8	Uji aktivitas antimalaria secara <i>in vitro</i>	50
III.2.9	Kajian bioinformatika senyawa hibrida xanton	52
III.2.10	Penambatan molekul senyawa hibrida xanton	52
III.2.11	Simulasi dinamika molekul senyawa hibrida xanton.....	53
III.2.11	Kajian <i>drug-likeness</i> dan ADMET senyawa hibrida xanton.....	54
BAB IV	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN.....	55
IV.1	Sintesis Turunan Hidroksixanton, Hibrida Xanton-Asam Lemak dan Xanton-Sinamat	56
IV.1.1	Sintesis asam salisilat dari minyak gondopuro	56
IV.1.2	Sintesis senyawa monohidroksixanton	57
IV.1.3	Sintesis senyawa dihidroksixanton	59
IV.1.4	Uji sitotoksitas senyawa hidroksixanton secara <i>in vitro</i>	61
IV.1.5	Sintesis senyawa hibrida xanton-asam lemak.....	62
IV.1.5.1	Sintesis senyawa xantil asetat	62
IV.1.5.2	Sintesis senyawa xantil laurat	69
IV.1.5.3	Sintesis senyawa hibrida xanton-asam lemak lainnya	74
IV.1.6	Sintesis senyawa hibrida xanton-sinamat	77
IV.1.6.1	Sintesis senyawa xantil benzoat	77
IV.1.6.2	Sintesis senyawa xantil sinamat.....	83
IV.1.6.3	Sintesis senyawa xantil sinamat tersubstitusi.....	88
IV.2	Aktivitas Antikanker Hibrida Xanton	91
IV.2.1	Uji aktivitas antikanker hibrida xanton secara <i>in vitro</i>	91
IV.2.2	Prediksi mekanisme aktivitas antikanker senyawa hibrida xanton sebagai agen antikanker paru-paru	98
IV.2.3	Prediksi mekanisme aktivitas antikanker senyawa hibrida xanton sebagai agen antikanker usus besar	102
IV.2.4	Prediksi mekanisme aktivitas antikanker senyawa hibrida xanton sebagai agen antikanker payudara	105
IV.2.5	Prediksi mekanisme aktivitas antikanker senyawa hibrida xanton sebagai agen antikanker leher rahim	108
IV.2.6	Penambatan molekul, simulasi dinamika molekul, dan prediksi ADMET dari senyawa hibrida xanton sebagai agen antikanker.....	111
IV.3	Aktivitas Antimikroba Hibrida Xanton.....	126
IV.3.1	Aktivitas antimikroba senyawa hibrida xanton-asam lemak secara <i>in vitro</i>	126

IV.3.2	Prediksi mekanisme aktivitas antimikroba senyawa hibrida xanton-asam lemak.....	130
IV.3.3	Aktivitas antimikroba senyawa hibrida xanton-sinamat secara <i>in vitro</i>	145
IV.3.4	Prediksi mekanisme aktivitas antimikroba senyawa hibrida xanton-sinamat	149
IV.4	Aktivitas Antimalaria Hibrida Xanton	164
IV.4.1	Skrining potensi aktivitas antimalaria senyawa hibrida xanton melalui uji penghambatan polimerisasi heme	164
IV.4.2	Uji aktivitas antimalaria senyawa hibrida xanton terhadap <i>P. falciparum</i>	166
IV.4.3	Penambatan molekul, simulasi dinamika molekul, dan prediksi ADMET dari senyawa hibrida xanton sebagai agen antimalaria	170
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	184
V.1	Kesimpulan.....	184
V.2	Saran.....	185
DAFTAR PUSTAKA		186
LAMPIRAN.....		202