UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Studi In Silico, Sintesis, dan Uji Aktivitas Antioksidan Senyawa Turunan Kalkon Analog AEW-1 Sebagai Kandidat Inhibitor COX-2
Fitriana Nur Hanifah, Prof. Dr. apt. Ratna Asmah Susidarti, M.S.; Dr.rer.nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN ii
SURAT PERNYATAAN iii
KATA PENGANTAR iv
DAFTAR ISI vi
DAFTAR TABEL ix
DAFTAR GAMBAR x
DAFTAR LAMPIRAN xii
INTISARI xiii
ABSTRACT xiv
BAB I PENDAHULUAN 1
A. Latar Belakang Penelitian 1
B. Perumusan Masalah 5
C. Keaslian Penelitian 6
D. Manfaat Penelitian 6
E. Tujuan Penelitian 7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA 8
A. Telaah Pustaka 8
1. Inflamasi 8
2. Obat anti-inflamasi 12
3. *In silico* (penambatan molekuler, dinamika molekuler, ADMET) 15
4. Kalkon 19
5. Sintesis dan aktivitas biologis turunan kalkon 21
6. *Microwave-assisted organic synthesis* (MAOS) 24
6. Antioksidan 26
7. Uji aktivitas antioksidan 27
B. Landasan Teori 30

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Studi In Silico, Sintesis, dan Uji Aktivitas Antioksidan Senyawa Turunan Kalkon Analog AEW-1 Sebagai Kandidat Inhibitor COX-2
Fitriana Nur Hanifah, Prof. Dr. apt. Ratna Asmah Susidarti, M.S.; Dr.rer.nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

C. Kerangka Konsep 33
D. Keterangan Empiris 34
E. Hipotesis 34
BAB III METODE PENELITIAN 35
A. Desain Penelitian 35
B. Alat dan Bahan 36
1. Alat penelitian 36
2. Bahan penelitian 37
C. Identifikasi Variabel Penelitian 37
1. Penambatan molekuler 37
2. Dinamika molekuler 38
3. Uji aktivitas antioksidan 38
D. Definisi Operasional 38
E. Jalannya Penelitian 40
1. Penambatan molekuler 40
2. Cek kebaruan dan prediksi ADMET 41
3. Dinamika molekuler 42
4. Sintesis senyawa turunan kalkon 43
5. Uji aktivitas antioksidan 44
F. Analisis Data 45
1. Penambatan molekuler 45
2. Prediksi ADMET 46
3. Dinamika molekuler 47
4. Sintesis senyawa turunan kalkon 47
5. Uji kemurnian hasil sintesis 47

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Studi In Silico, Sintesis, dan Uji Aktivitas Antioksidan Senyawa Turunan Kalkon Analog AEW-1 Sebagai Kandidat Inhibitor COX-2
Fitriana Nur Hanifah, Prof. Dr. apt. Ratna Asmah Susidarti, M.S.; Dr.rer.nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

6. Aktivitas antioksidan 48

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN 50

A. Penambatan molekuler dan Prediksi pIC_{50} 50

B. Prediksi ADMET dan Kebaruan Senyawa 69

1. Prediksi ADMET 69

2. Kebaruan Senyawa 74

C. Dinamika molekuler 75

D. Sintesis Senyawa Turunan Kalkon (2*E*)-3-(piridin-2-il)-1-(2,4,5-trimetoksifenil)prop-2-en-1-on (L) 89

E. Uji Aktivitas Antioksidan 109

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN 114

A. Kesimpulan 114

B. Saran 115

DAFTAR PUSTAKA 116

LAMPIRAN 132