

QSAR, *Docking* Molekul, dan Sintesis Senyawa Turunan Kalkon sebagai Kandidat Obat Antimalaria Masa Depan

Jufrizal Syahri¹, Bambang Purwono², Ria Armunanto²

¹Jurusan Kimia Fakultas MIPA dan Kesehatan, Universitas Muhammadiyah Riau

²Departemen Kimia Fakultas MIPA, Universitas Gadjah Mada

Abstrak — Malaria merupakan penyakit menular yang disebabkan oleh infeksi parasit *Plasmodium* pada sel darah merah manusia. Penyakit ini telah menginfeksi sekitar 212 juta orang di Dunia, dan 429 orang diantaranya meninggal dunia. Tingginya angka kematian yang disebabkan oleh malaria ini dipicu oleh resistensi parasit *Plasmodium* terhadap obat antimalaria utama yaitu klorokuin dan artemisinin. Saat ini menjadi kebutuhan mendesak untuk mengembangkan obat antimalaria baru yang efektif dan efisien dengan biaya yang terjangkau, karena tanpa obat antimalaria baru kemungkinan malaria akan menjadi penyakit yang tidak terobati pada beberapa dasawarsa. Salah satu senyawa alam yang potensial untuk menjadi kandidat obat antimalaria baru adalah senyawa turunan kalkon. Proses mendapatkan senyawa turunan kalkon yang memiliki aktivitas antimalaria terbaik dilakukan dengan mendesain senyawa menggunakan analisis *Quantitative Structure-Activity Relationships* (QSAR) dan *docking* molekul. Senyawa kalkon hasil desain dilakukan sintesis dan uji aktivitas antimalaria secara *in-vitro* di laboratorium. Penelitian ini memperoleh empat senyawa turunan kalkon yang secara komputasi dan eksperimen memiliki aktivitas antimalaria terbaik, dengan nilai IC_{50} eksperimen berturut-turut adalah 1,12; 0,62; 0,59; dan 0,54 μ M. Aktivitas yang kuat ini memberikan harapan sebagai kandidat obat antimalaria baru dari senyawa turunan kalkon. Hal ini didukung juga oleh data *docking* molekul yang menunjukkan keempat senyawa ini juga membentuk *binding pocket* dengan asam amino penting dari malaria, yaitu asam amino Ala16, Phe58, Ile164, Tyr170, Leu119.

Kata kunci: Antimalaria, *Docking*, Kalkon, *Plasmodium*, QSAR