

**PETUNJUK PRAKTIKUM
RANCANGAN OBAT
EDISI III**



Disusun Oleh :

Dian Agung Pangaribowo, S.Farm., M.Farm., Apt.

Indah Purnama Sary, S.Farm., M.Farm., Apt.

Ari Satia Nugraha, Ph.D., Apt.

Dwi Koko Pratoko, S.Farm., M.Sc., Apt.

**LABORATORIUM KIMIA MEDISINAL
BAGIAN KIMIA FARMASI FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS JEMBER**

2015

KATA PENGANTAR

Puji syukur kami panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa. Atas berkat dan rahmat-Nya, penulisan buku petunjuk praktikum Rancangan Obat dapat kami selesaikan. Materi-materi yang ditampilkan dalam Rancangan Obat mengarah pada pemberian dasar-dasar bagi desain organik molekul obat.

Pada dasarnya materi yang ada dalam buku ini merupakan penerapan prinsip-prinsip sintesis organik dalam dunia kefarmasian, khususnya obat. Hal ini selaras dengan perkembangan obat yang sebagian besar merupakan senyawa organik, baik melalui sintesis laboratorium maupun isolasi dari bahan alam.

Kami mengucapkan terima kasih kepada rekan-rekan yang telah memberikan sumbangan terutama materi-materi dalam petunjuk praktikum Rancangan Obat. Kami menyadari buku ini kurang sempurna, demi kesempurnaan buku ini penyusun dengan senang hati menerima kritik dan saran.

Jember, Oktober 2015

Penyusun

DAFTAR ISI

Kata Pengantar	2
Daftar Isi	3
Tata Tertib	4
Sistem Penilaian	5
Format Laporan	6
BAB I. Penambatan molekuler	7
BAB II. Pendahuluan Sintesis Bahan Obat	13
BAB III. Teknik-Teknik Dasar dalam Sintesis Organik.....	26
BAB IV. Sintesis Asam Asetil Salisilat	33
BAB V. Sintesis 1-(4'-Metilfenil)-3-(3',4'-Dimetoksifenil)-2-Propenon	36
BAB VI. Sintesis Paranitroasetanilid.....	38
BAB VII. Sintesis Iodoform	40
Daftar Pustaka	43
Lampiran	45

TATA TERTIB

Tata-tertib yang wajib diketahui dan dipatuhi peserta praktikum :

1. Praktikum dilakukan secara kelompok.
2. Pelaksanaan praktikum dilakukan sesuai jadwal waktu dan jadwal materi.
3. Sebelum mengikuti praktikum dilakukan tes pendahuluan tentang materi yang akan dilakukan.
4. Tes atau responsi sebelum praktikum dilaksanakan pada hari dan jam praktikum, kecuali atas izin dosen penanggung jawab praktikum.
5. Pada waktu mengikuti tes pendahuluan, praktikan harus membawa laporan sementara (Jurnal).
6. Pada waktu praktikum, paraktikan harus menulis laporan hasil percobaan pada lembar hasil percobaan.
7. Pada akhir praktikum, laporan hasil percobaan harus dimintakan tanda tangan pada dosen jaga atau asisten jaga.
8. Laporan praktikum dikumpulkan paling lambat pada saat akan mengikuti praktikum berikutnya.
9. Praktikan dianggap gagal dan tidak akan mendapatkan nilai praktikum apabila tidak mengikuti praktikum lebih dari satu kali tanpa ada alasan yang jelas dan legal.
10. Pada akhir periode praktikum akan dilakukan ujian akhir praktikum. Materi dan jadwal akan diumumkan secara terpisah dari buku ini.
11. Hal-hal yang belum tercantum dalam tata-tertib ini akan diatur lebih lanjut oleh dosen penanggung jawab praktikum.

Koordinator Praktikum Rancangan Obat

Dian Agung P, S.Farm.M. Farm, Apt.

SISTEM PENILAIAN

Nilai akhir praktikum terdiri dari :

- a. Nilai tes pendahuluan : 20 %
- b. Nilai jurnal : 10 %
- c. Nilai laporan praktikum : 20 %
- d. Nilai ujian akhir praktikum : 50 %

Nilai Huruf Mutu :

- A : $NA \geq 80$
- B : $79 \geq NA \geq 60$
- C : $59 \geq NA \geq 50$
- D : $50 \geq NA \geq 40$
- E : $40 \geq NA$

FORMAT LAPORAN

Laporan Sementara (Jurnal)

- Judul Percobaan
- Tujuan Percobaan
- Teori Dasar
- Prosedur Kerja Asli
- Bahan dan Alat
- Cara Kerja
- Mekanisme Reaksi
- Perhitungan Teoritis
- Deskripsi bahan awal (starting material) dan hasil percobaan (pemerian dan sifat kimia fisika)
- Daftar Pustaka

Laporan Akhir

- Judul Percobaan
- Tujuan Percobaan
- Teori Dasar
- Bahan dan Alat
- Cara Kerja
- Skema Alat
- Mekanisme Reaksi
- Hasil Percobaan
- Perhitungan Rendemen
- Pembahasan
- Kesimpulan
- Daftar Pustaka

BAB I

PENAMBATAN MOLEKULER (*MOLECULAR DOCKING*)

A. Tujuan Percobaan:

Melakukan penambatan molekul ligan ke protein

B. Teori Dasar:

Rancangan obat diterapkan dalam upaya untuk mendapatkan obat baru, berdasarkan penalaran yang rasional dengan semaksimal mungkin mengurangi faktor coba-coba. Secara tidak langsung hal ini akan dapat menghemat waktu, biaya, tenaga dan pikiran. Penalaran yang rasional mengandung pengertian tidak merasionalkan data yang telah ada, tetapi cenderung terletak pada hasil pengolahan data. Kesimpulan yang mengandung kekuatan perkiraan jauh lebih berguna daripada hanya berupa ringkasan dari sekumpulan pengamatan.

Secara umum, metode-metode dalam desain obat mengikuti dua pendekatan, yaitu: Desain Obat Berbasis Ligan (*Ligand-based Drug Design*, LBDD) dan Desain Obat Berbasis Struktur Target (*Target/Structure-based Drug Design*, SBDD). Perbedaan kedua pendekatan tersebut terletak pada penggunaan informasi sebagai *starting material* untuk proses perancangan obat. Pendekatan LBDD didasarkan pada informasi struktur (2D/3D) ligan beserta aktivitas biologisnya, sedangkan pendekatan SBDD didasarkan pada informasi struktur 3D protein target. Metode-metode yang populer dalam pendekatan LBDD misalnya QSAR dan *Pharmacophore Mapping*, sedangkan pendekatan SBDD misalnya *Docking* dan *De novo Design*. Meskipun demikian, dalam prakteknya kedua pendekatan seringkali digunakan bersama dan saling melengkapi agar proses desain mempunyai kemampuan prediktif yang lebih baik.

Salah satu metode yang sangat populer dalam pendekatan SBDD adalah *docking* molekuler. *Docking* merupakan suatu metode dalam pemodelan molekul yang digunakan untuk memprediksi orientasi dan afinitas suatu ligan (molekul kecil) yang terikat dalam situs aktif suatu makromolekul (protein) target untuk membentuk kompleks protein-ligan yang stabil. *Docking* dapat diasumsikan sebagai problem “*key and lock*”. Program *docking* biasanya memperlakukan

protein sebagai bagian yang rigid, sedangkan ligan diperlakukan sebagai bagian yang fleksibel. Dalam docking, terdapat 2 problem utama yang harus diselesaikan secara simulatif, yaitu:

(1) Bagaimana pose atau geometri (lokasi, konformasi, dan orientasi) ligan terikat pada situs aktif protein targetnya?

(2) Bagaimana menentukan kekuatan interaksi (afinitas) antara ligan dengan protein targetnya?

Problem pertama diselesaikan dengan menerapkan algoritma pencarian pose (*searching/placement algorithm*). Sedangkan problem kedua diselesaikan dengan menerapkan perhitungan menggunakan *scoring function*. Hingga saat ini telah banyak algoritma-algoritma pencarian dan *scoring function* yang ditawarkan yang menerapkan metode komputasi berbeda, yang telah diadopsi oleh berbagai *software docking*.

Pada tutorial ini akan dicontohkan cara melakukan penambatan inhibitor derivat kalkon pada Epidermal Growth Factor Receptor (EGFR) kinase (1XKK.pdb). EGFR kinase merupakan protein regulator yang memainkan peran penting dalam memediasi pertumbuhan sel. Oleh karena itu, protein ini menjadi target yang potensial bagi pencarian obat-obatan antikanker.

C. Alat dan Bahan

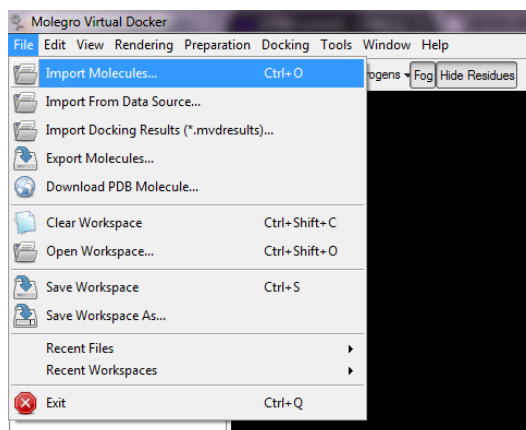
- Perangkat keras : Komputer PC
- Sistem operasi : Windows
- Perangkat lunak : Molegro Virtual Docker
- Data : File PDB

D. Cara Kerja

a. Mengimpor file

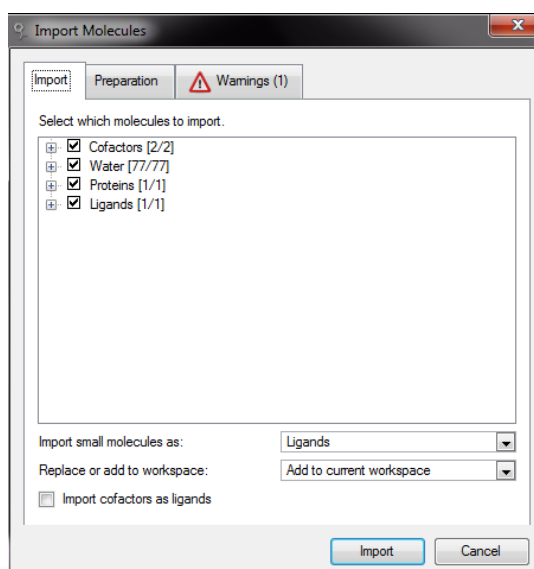
1. Pilih **File** | **Import Molecules** | 1XKK.pdb

MVD menunjang file dalam format PDB, Mol2, SDF, dan XML-based format, MVDML.

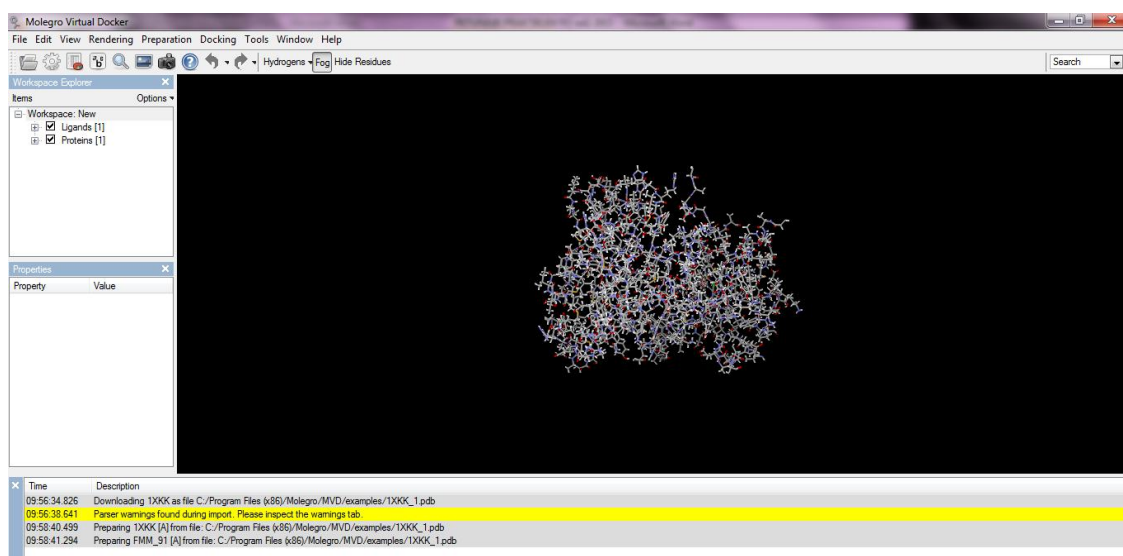


2. Pilih file ligan yang akan di impor dan klik **Open**

3. Akan muncul

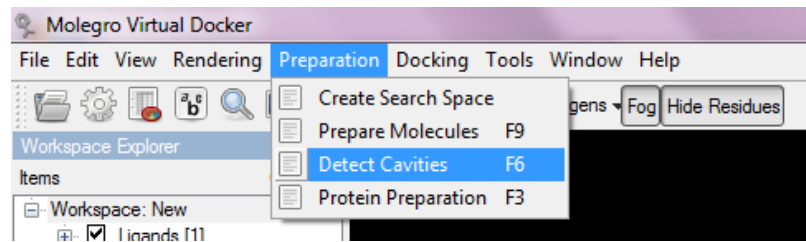


4. Klik **Import**. Protein dan ligan akan muncul pada *Visualization Window*



b. Memprediksi tempat pengikatan

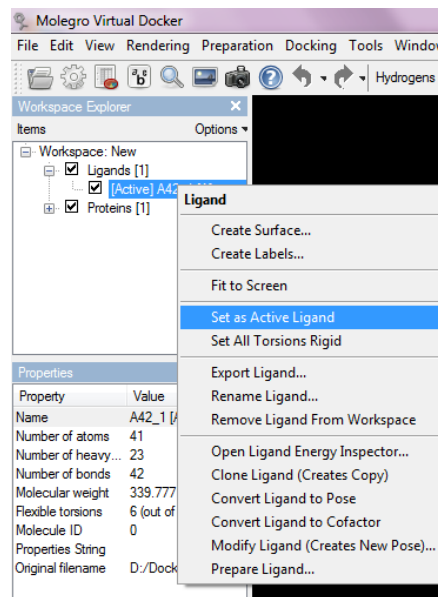
1. Klik **Preparation | Detect Cavities**



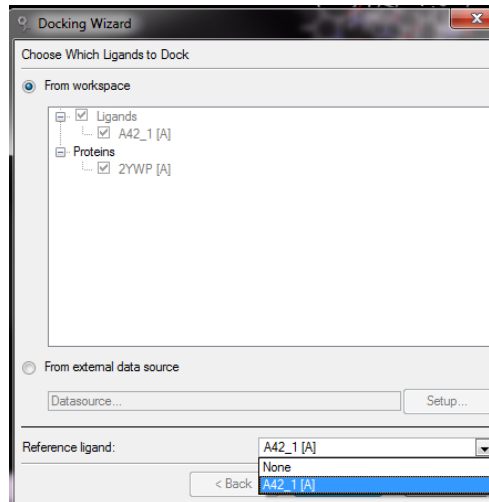
2. Klik **OK**

c. Menjalankan simulasi penambatan molekuler *co-crystal ligand*

1. Jika ligan yang tersedia berjumlah lebih dari satu, maka ligan aktif dapat dipilih dengan mengklik kanan ligan pada jendela pertama, kemudian pilih **Set as Active Ligand**



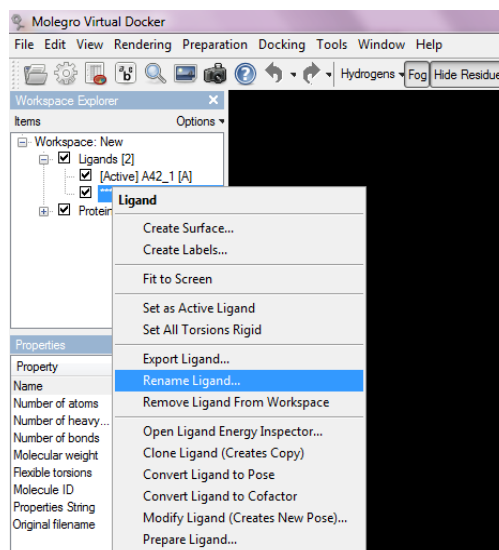
2. Pilih menu **Docking | Docking Wizard**. Pilih ligan yang sesuai sebagai Reference ligand



3. Klik **Next**
4. Pada bagian Binding Site: Origin, pilih cavity yang sesuai
5. Klik **Next** dan untuk memulai penambatan molekuler klik **Start**

d. Menjalankan simulasi penambatan molekuler ligan uji

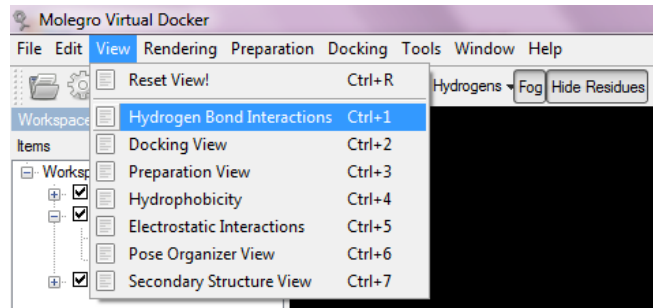
1. Import file ligan yang akan diuji.
2. Ubah nama ligan dengan mengklik kanan ligan, lalu pilih **Rename Ligand**



3. Pilih ligan uji sebagai ligan aktif
4. Atur posisi ligan uji dengan cara mengklik 3 atom pada ligan uji dan 3 atom pada co-crystal ligand, lalu klik kanan dan pilih **Align To this Molecule**
5. Lakukan penambatan molekuler dengan tahapan yang sama dengan simulasi penambatan molekuler *co-crystal ligand*

e. Menampilkan ikatan Hidrogen

1. Pilih ligan menjadi ligan aktif
2. Klik **View | Hydrogen Bond Interaction**



3. Untuk mengembalikan tampilan, klik **View | Reset View**

E. TUGAS

1. Lakukan simulasi penambatan molekuler dan tentukan skor (*Rerank Score*) dari pose yang terbaik, untuk masing-masing senyawa
 - a. *Co-crystal ligand* reseptor 1XKK (lapatinib)
 - b. 1,3-Difenil-2-propen-1-on
 - c. 1-(4'-Metilfenil)-3-(3',4'-dimetoksifenil)-2-propenon
2. Dilihat dari interaksi ikatan Hidrogen, gugus manakah dari senyawa yang berinteraksi dengan asam amino pada protein reseptor
 - a. *Co-crystal ligand* reseptor 1XKK (lapatinib)
 - b. 1,3-Difenil-2-propen-1-on
 - c. 1-(4'-Metilfenil)-3-(3',4'-dimetoksifenil)-2-propenon
3. Bandingkan *Rerank Score* antara 1,3-difenil-2-propen-1-on dan 1-(4'-Metilfenil)-3-(3',4'-dimetoksifenil)-2-propenon. Kesimpulan apakah yang dapat saudara ambil?

BAB II

PENDAHULUAN SINTESIS BAHAN OBAT

Sintesis bahan obat merupakan ilmu sekaligus menjadi sebuah alat bagi seorang farmasis atau perancang obat dalam pengembangan struktur obat baru. Dalam dunia kefarmasian, dimana dunia kita terletak diantara dunia kimia dan kedokteran, sintesis bahan obat memberikan tanggung jawab kepada farmasis antara lain untuk melakukan dan mengembangkan :

1. Sintesis bahan kimia yang terdapat di alam.
2. Sintesis bahan kimia yang mempunyai struktur mirip dengan di alam.
3. Sintesis bahan kimia yang tidak terdapat di alam.
4. Sintesis bahan aktif anorganik yang dimasukkan ke dalam bahan organik.
5. Sintesis untuk memodifikasi struktur.
6. Sintesis kombinasi.

Dalam kerja sintesis dikenal istilah ukuran besarnya kerja sintesis, yaitu :

No	Preparation	Recatant Volume
1	Micro scale	0,5 – 5 ml
2	Semi micro scale	5 – 25 ml
3	Small Scale	25 – 250 ml
4	Analitic ▪ Analitical Scale ▪ Large Analitical Scale	250 – 500 ml 500 – 1000 ml
5	Preparative ▪ Preparative Scale ▪ Large preparation scale	1000 – 3000 ml 3000 – 5000 ml
6	Production Scale	> 5000 ml

Pembagian oleh ahli-ahli kimia (organik) : Vogel, A., Weisbesger, A., Gilman, Perry, J.H., Wibaut, R.A. (Samhoedi, 1976)

A. Keselamatan Kerja Laboratorium

Sintesis bahan obat merupakan bagian dari sintesis organik yang lebih mengedepankan pada aspek pembuatan obat. Pekerjaan sintesis tidak lepas dari penanganan-penanganan reaksi kimia dari tingkat *soft reaction* sampai *vigerous reaction* yang semuanya membutuhkan perhatian khusus. Bahan-bahan organik dan bahan pendukung sistesis organik mempunyai karakter fisika kimia yang harus kita

perhatikan dalam hal penanganan yang tepat dan keselamatan. Instrumentasi sintesis sedemikian rupa hingga membutuhkan kejelian dalam menjaga kondisi reaksi dan mencegah kerusakan (terutama *glass ware*) sehingga pada akhirnya proses sintesis dapat berjalan sesuai rancangan dan aman.

Hal yang tak kalah penting dalam kerja sintesis organik adalah keselamatan kerja di laboratorium yang meliputi hal-hal sebagai berikut :

a. Keselamatan Personal

Hal-hal yang harus diperhatikan :

1. Jangan bekerja sendirian di laboratorium.
2. Jangan melakukan percobaan yang berbahaya (tanpa pengetahuan yang cukup, instrumen yang memadai dan ketrampilan khusus).
3. Jangan menyentuh langsung, menghirup atau merasakan senyawa organik.
4. Gunakan air yang cukup untuk menghilangkan sisa-sisa asam atau basa.
5. Jangan membuang senyawa organik dalam *wastafel*.
6. Gunakan jas lab yang sesuai dan memadai.
7. Ikatlah rambut hingga lebih praktis.
8. Gunakan sepatu sebagai alas kaki (bukan sandal).
9. Cuci tangan sebelum meninggalkan laboratorium.
10. Gunakan masker yang sesuai.
11. Gunakan kaca-mata khusus/pengaman.
12. Bila bekerja dalam kondisi yang korosif gunakan pelindung muka yang sesuai.
13. Jangan membawa makanan minuman di laboratorium.

b. Kecelakaan Laboratorium

Mata terkena senyawa kimia

1. Bahan kimia mengenai mata.
2. Cucilah mata dengan air mengalir selama kurang lebih 15 menit.
3. Jangan lakukan reaksi netralisasi di mata.
4. Lakukan penanganan medis.

Kebakaran kimia

1. Bahan kimia yang mengenai tubuh harus segera dicuci dengan air
2. Senyawa asam menyebabkan rasa sakit, sedangkan basa relatif tidak menimbulkan rasa sakit pada kulit tetapi mampu merusak jaringan

Kebakaran panas/api

1. Panas karena gelas-gelas yang panas, diatasi dengan perendaman dalam air dingin 5-10 menit. Gunakan lotion buat luka bakar
2. Kebakaran pada jas/baju, langkah pertama badan diguling-gulingkan ke lantai. Segera bawa ke rumah sakit.

Luka potong

1. Luka minor karena gelas-gelas, basuh dengan air dingin, singkirkan bahan-bahan yang tersisa pada luka. Balut dengan pembalut yang sesuai.
2. Luka mayor, Badan direbahkan dan dijaga agar tetap hangat. Balut luka dengan pembalut luka.

Menghirup racun

1. Jangan menghirup senyawa-senyawa organik.
2. Apabila tidak sengaja menghirup, segera pindah ke ruangan yang berudara segar.

c. Kebakaran Laboratorium

Hal-hal yang harus diperhatikan :

Waspada terhadap hal-hal atau langkah kerja yang dapat menimbulkan kebakaran. Padamkan dengan *fire extinguisher*

d. Penanganan Bahan Kimia

Senyawa asam-basa

Lakukan penambahan asam pekat kedalam air (**jangan terbalik**) !!! (lakukan pada suhu dingin). Jangan membuang sisa asam-asam sebelum diencerkan dengan air yang banyak. Apa bila terkena asam, maka cucilah dengan air. Basa (Contoh : NaOH), dapat merusak jaringan. Jangan membuang sisa basa sebelum dinetralkan.

Pelarut-pelarut

Pelarut organik mempunyai sifat toksik dan mudah terbakar. Golongan eter mempunyai titik didih yang rendah dan sangat mudah terbakar, sehingga harus

dijauhkan dari api. Karbon disulfida (CS_2) mempunyai karakter titik didih sekitar $100\text{ }^\circ C$, tetapi mempunyai sifat mudah terbakar meskipun hanya kontak dengan uap. Benzena bersifat toksik dan mudah terbakar, hindarkan dari percikan, inhalasi dan kontak dengan kulit. Alkil halida bersifat toksik dan karsinogenik.

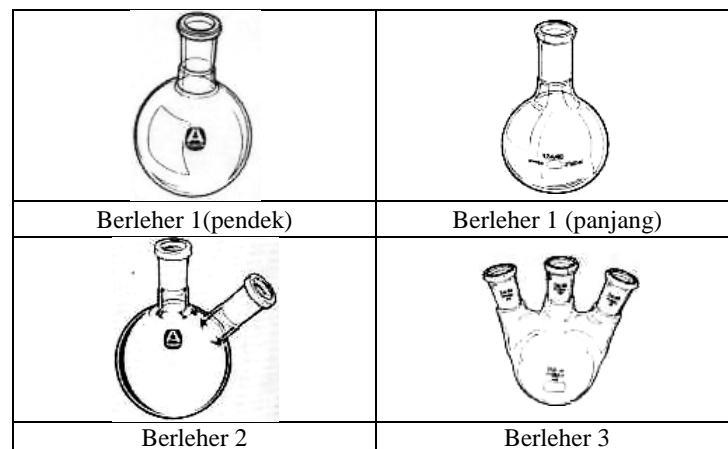
B. Alat-alat laboratorium

a. Alat gelas

Labu

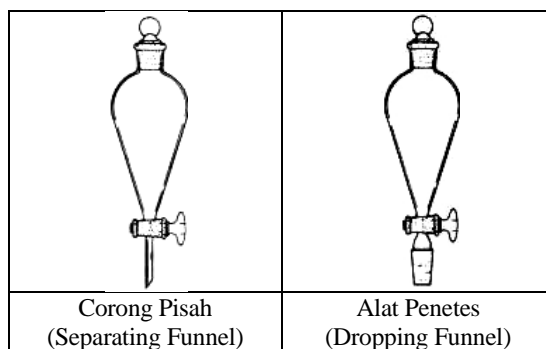
Untuk mencampur reaktan-reaktan, modelnya dari berleher 1 sampai 4. Ukurannya tergantung dari kebutuhan (*micro scale, mini scale or macro scale*). Panjang leher tergantung dari maksud instalasi, misalnya untuk destilasi biasanya memakai leher pendek untuk menghindari uap yang akan keluar lewat leher kembali ke campuran pereaksi. Labu dengan leher lebih dari satu dapat digunakan untuk, antara lain.

- Menempatkan motor pengaduk
- Saluran mencampur bahan
- Menempatkan termometer



Corong Pisah (*separating funnel*) dan Alat penetes (*dropping funnel*)

Corong pisah digunakan untuk memisahkan/mengisolasi bahan yang diinginkan. Prinsip kerja yang digunakan adalah ekstraksi dengan pelarut yang tidak saling campur. Alat penetes merupakan modifikasi dari corong pisah yang dapat digunakan untuk menambahkan larutan ke dalam campuran pereaksi.

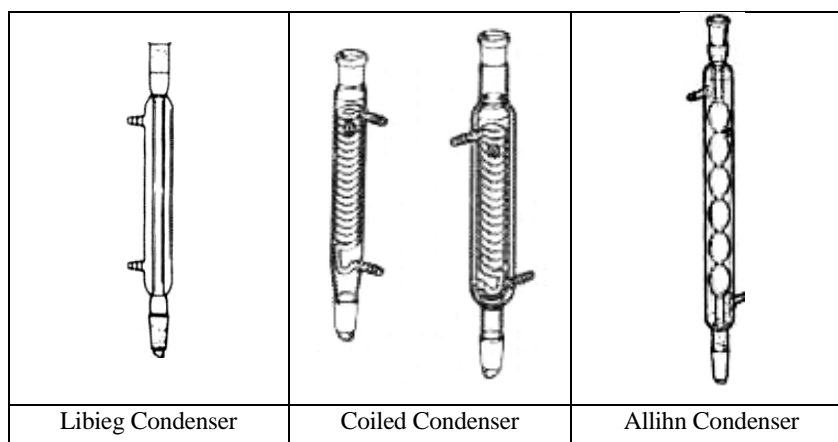


Pendingin (Condenser)

Merupakan alat gelas yang digunakan untuk memberikan kondisi dingin untuk tujuan membentuk kondensat. Misalnya pada destilasi untuk membuat uap menjadi kondensat (tetesan), pada refluks untuk menghindari hilangnya komponen pereaksi karena penguapan (reaksi dengan penambahan panas).

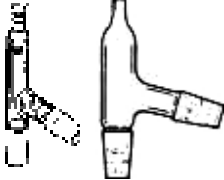


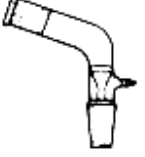


Macam-macam pendingin:

- *Libieg Condenser* : Secara umum dipakai dalam destilasi.
 - Panjang 40 cm = temperatur 120 – 150 °C (*no water flow*)
 - Panjang 40 cm = temperatur 100 – 120 °C
 - Panjang 60 cm = temperatur 80 - 100 °C
 - Panjang 80 cm = temperatur < 80 °C
- *Coiled Condenser* : Dipakai dalam refluks campuran pereaksi
- *Allihn Condenser* : Dipakai dalam refluks campuran pereaksi
 - *Four bulb* (20 cm) = temperatur 60 – 80 °C
 - *Six bulb* (40 cm) = temperatur 50 – 60 °C
 - *Eight bulb* (40 cm) = temperatur < 50 °C






Penghubung (Adaptor)

Penghubung berfungsi untuk menghubungkan antar instrumen utama. Penghubung kadang didesain khusus untuk menempatkan instrumen lain (adaptor with thermometer), untuk menempatkan alat hisap (*alonga adaptor with suction cannell*), adaptor yang digunakan untuk menyalurkan pereaksi dan sebagainya.

		
Adaptor destilasi plus thermometer	Adaptor destilasi	Adaptor dengan lubang aliran pereaksi (Claisen Adaptor)
		
Adaptor penampung dengan lubang penghisap	Adaptor penampung dengan lubang penghisap	Adaptor penampung terbuka





Penampung kompak (*collecting flask*)

Merupakan labu alas bulat yang relatif kecil untuk menampung hasil isolasi. (biasanya isolasi dengan proses penghisapan). Penampung dapat menggunakan alat lain seperti beker, erlenmeyer dan hal ini harus memperhatikan sifat fisika kimia isolat.

		
Collecting Flask	Erlenmeyer	Beker Glass

Corong

Selain corong biasa, ada beberapa jenis lain yang mempunyai kegunaan yang berbeda, seperti corong untuk serbuk, corong untuk penyaringan (umumnya dengan bantuan penghisapan).

	
Corong biasa	Corong serbuk
	
Corong Buchner (for vacuum filtration)	Corong Hirsch (for vacuum filtration)

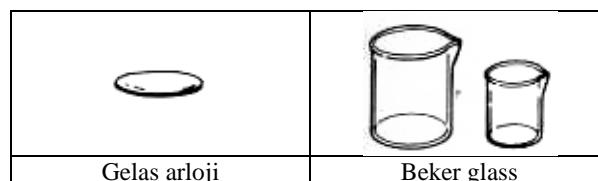
Gelas filtrasi

Mempunyai bentuk seperti erlenmeyer dengan ketebalan yang lebih dan dilengkapi dengan saluran untuk penghisapan. Digunakan dalam proses penyaringan yang dibantu dengan penghisapan.



Alat-alat gelas lain.

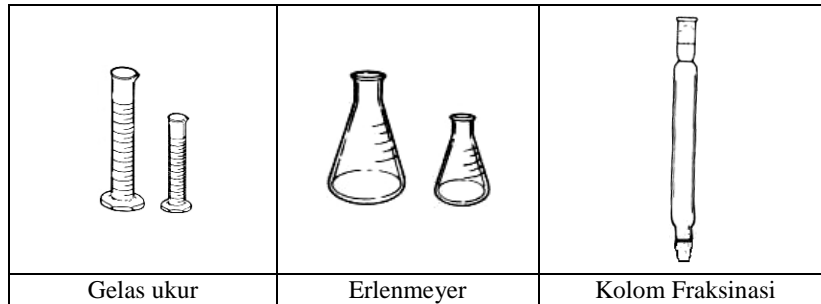
Alat-alat gelas lain yang biasa digunakan antara lain seperti gelas arloji yang digunakan untuk menutup beker glass atau digunakan dalam kerja reaksi pengendapan. Gelas ukur untuk mengukur volume cairan. Erlenmeyer dapat juga digunakan untuk pencampuran pereaksi dimana reaksi dilakukan dalam suhu yang relatif rendah (tanpa pemanasan/refluks). Alat gelas lain adalah kolom fraksinasi yang digunakan untuk pemisahan komponen-komponen campuran (metode kromatografi kolom sederhana)



Catatan :

Prosedur Penyucian Alat gelas.

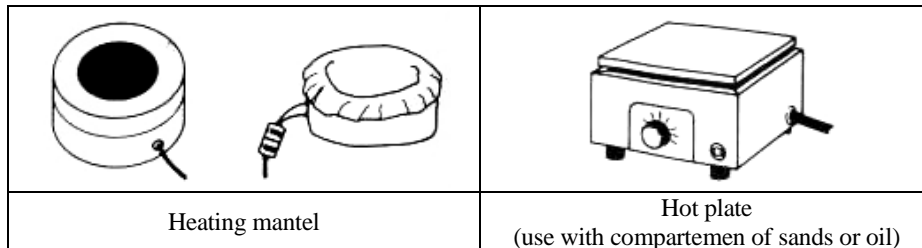
1. Cucilah dengan detergen (sampai bersih), basuh dengan air hingga *detergent* hilang.
2. Cucilah dengan ethanol (sedikit), biarkan sebentar sampai agak kering
3. Masukkan kedalam pengering/oven.



b. Alat Non Gelas

Alat Pemanas

Alat pemanas ada berbagai macam biasanya menggunakan mantel pemanas atau pemanas dengan bantuan oli atau pasir (suhu lebih dari 100 °C). Penggunaan *water bath* sangat jarang karena lebih praktis dengan menggunakan matel yang mempunyai kontrol pengatur suhu.



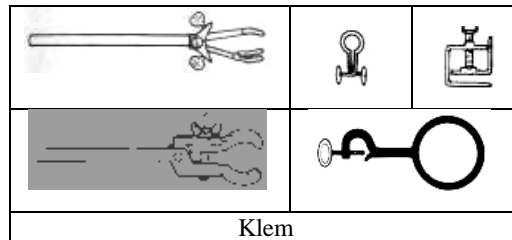
Adapter karet

Digunakan untuk membantu dalam menyatukan dua instrumen yang tidak memiliki *joint ass*, misalnya pada ujung corong buchner.



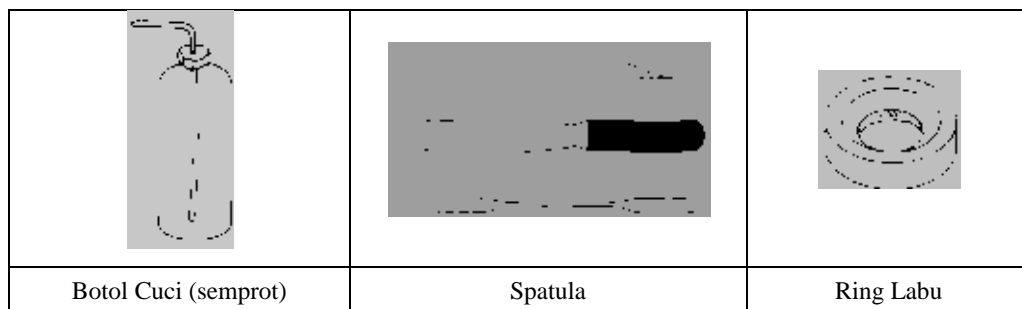
Klem

Klem digunakan untuk menjepit instrumen yang sudah didesain untuk tujuan tertentu. Klem ini disatukan dengan statif.



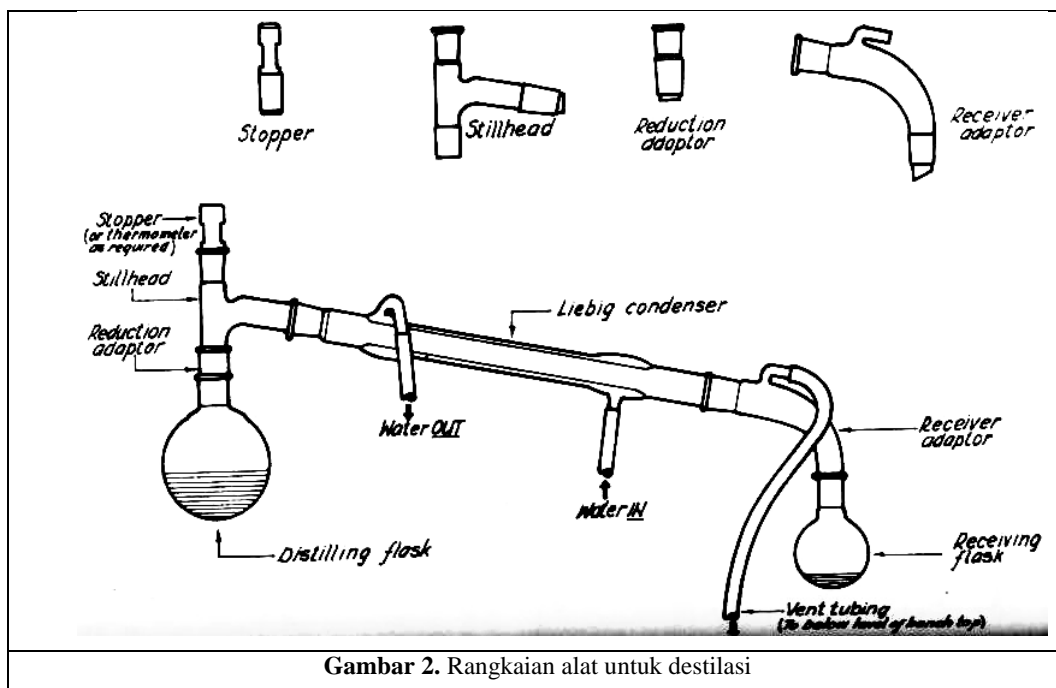
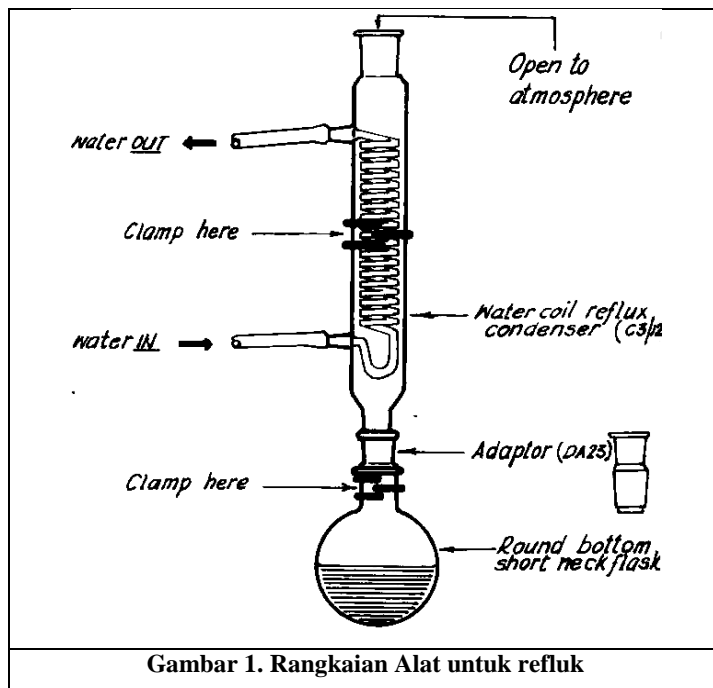
Alat-alat lain.

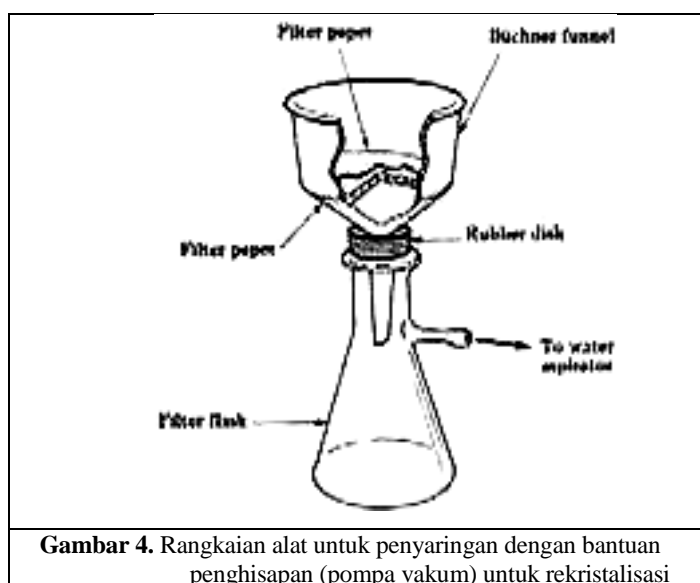
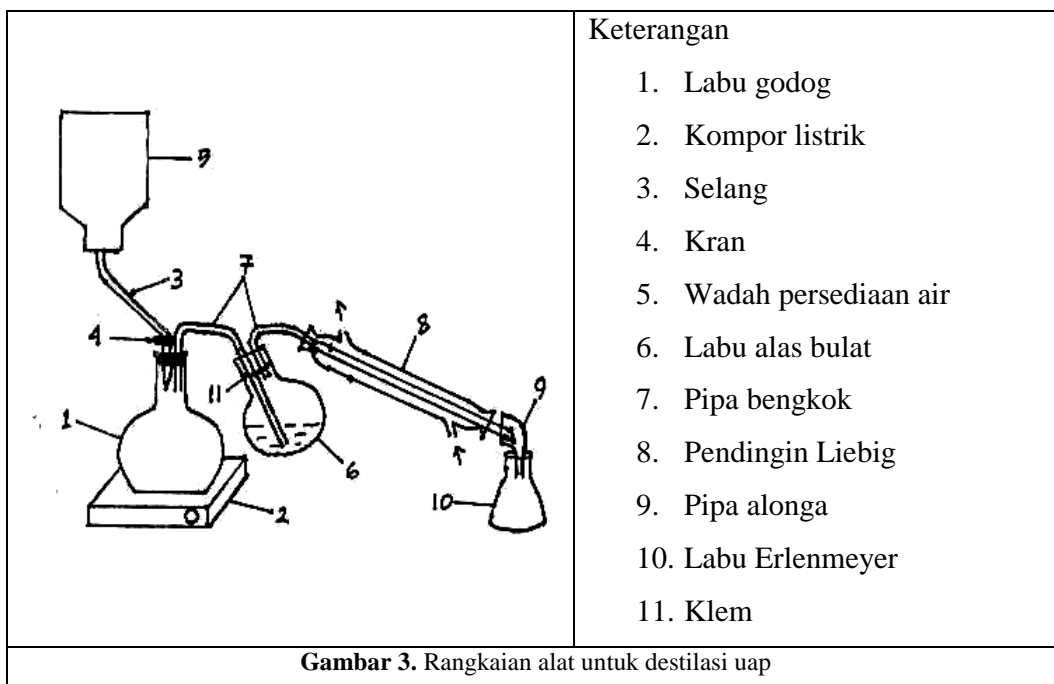
Alat-alat non gelas yang biasa digunakan dalam sintesis organik antara lain, Ring untuk meletakkan gelas labu. Botol semprot untuk menyemprotkan cairan dengan tujuan tertentu (misal pencucian alat gelas), spatula untuk memindahkan material padat.



C. Instalasi alat sintesis.

Dalam buku petunjuk ini, diberikan beberapa contoh instalasi dari refluks, destilasi dan filtrasi.





D. Catatan-catatan dalam Percobaan

Catatan berisi :

1. Judul percobaan
Merupakan judul percobaan
2. Persamaan kimia
Menunjukkan informasi formula reaktan dan produk, berat molekul, berat zat yang digunakan (hasil penimbangan), jumlah mol dan informasi properti fisika kimia yang lain.

3. Informasi keamanan

Memuat cara penanganan bahan-bahan kimia akan digunakan dalam percobaan.

4. Cara kerja

Dibuat dalam bentuk diagram. Informasi yang penting seperti kemudahan terbakar, titik didih dan sebagainya

5. Pengamatan

Memuat hasil pengamatan selama percobaan.

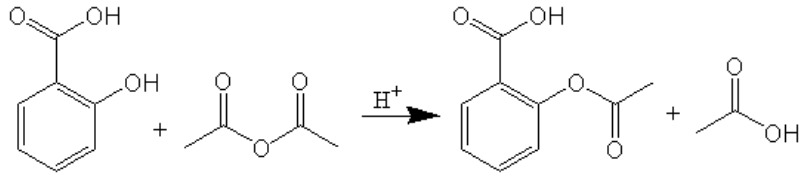
6. Kesimpulan

Memuat informasi fisika dan kimia dari produk atau hasil isolasi. Perhitungan rendemen.

$$\text{Rendemen} = \frac{\text{Berat hasil percobaan (g)}}{\text{Berat teoritis (g)}} \times 100(\%)$$

Contoh : Catatan Persamaan dan perhitungan kimia

Percobaan 1.1
Sintesis Asetil Salsilat



	BM : 138	102	180,16
	Berat : 3,5 g	3,5 ml(3,78 g)	4,5 g (teori)
M	Mol : 0,025	0,0367	0,025 (teori)

Perhitungan jumlah mol pereaksi

$$\text{Asam salisilat} = \frac{3,5g}{138g/mol} = 0,025 \text{ mol}$$

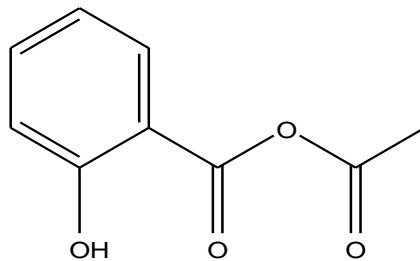
$$\text{Anhidrida asam} = \frac{3,78g}{102g/mol} = 0,0367 \text{ mol}$$

Perhitungan berat produk teoritis

$$\text{Asetil salisilat} = 0,025 \text{ mol} \times 180,16 \text{ g/mol} = 4,5 \text{ g}$$

$$\text{Rendemen} = \text{berat hasil percobaan/berat teoritis} \times 100\%$$

Contoh : Catatan kesimpulan percobaan



asam asetilsalisilat

Titik Lebur : 132⁰ – 133⁰ C

3,2 g (71 %)

Percobaan : 1 Lab. Sintesis Bahan Obat

Dian Agung P

BAB III

TEKNIK-TEKNIK DASAR DALAM SINTESIS ORGANIK

A. Isolasi dan pemurnian senyawa organik

Dalam kenyataan hasil reaksi kimia merupakan campuran yang terdiri dari produk yang diinginkan, produk dari reaksi samping, starting material yang masih utuh dan pelarut. Hal ini menyebabkan proses pemurnian menjadi hal yang penting. Metode-metode yang dipergunakan dalam pemurnian senyawa organik :

- Destilasi
- Destilasi fraksial
- Destilasi dengan pengurangan tekanan
- Destilasi fraksial dengan pengurangan tekanan
- Destilasi uap
- Rekrystalisasi
- Sublimasi & sublimasi vakum
- Ekstraksi cair-cair
- Kromatografi kolom
- Sokletasi
- TLC
- PTC
- Kromatografi kertas

B. Pemurnian zat padat melalui rekrystalisasi

Prinsip dasarnya adalah pelarutan zat padat (crude) dalam pelarut panas/mendidih kemudian pembentukan kristal murni seiring dengan pendinginan pelarut. Pelarut yang sesuai baik adalah mampu melarutkan zat padat pada suhu panas tetapi sedikit larut dalam keadaan dingin. Langkah-langkah dalam rekrystalisasi :

1. Pemilihan pelarut:

Syarat pelarut yang baik antara lain :

- Dalam keadaan panas mampu melarutkan zat padat dan dalam keadaan dingin mampu mengkrystalkan zat padat tersebut.
- Pengotor harus lebih mudah larut dalam pelarut dingin dibandingkan dengan zat yang akan dimurnikan.
- Pelarut tidak boleh bereaksi secara kimia dengan zat yang akan dimurnikan.
- Titik didih pelarut harus lebih rendah dari titik didih zat yang dimurnikan.
- Titik didih pelarut harus cukup rendah sehingga akan mudah dihilangkan dalam proses pengeringan.
- Pelarut harus mempunyai tingkat toksisitas dan mudah terbakar yang rendah.

Catatan penting tentang pelarut-pelarut yang digunakan :

- Air : Digunakan ketika memungkinkan
- Methanol : Dihindarkan dari penghirupan
- Aseton : Harus dikeringkan sebelum digunakan
- Asam asetat : Higroskopis, mampu memberikan busa dalam keadaan panas
- Benzena : Karsinogenik
- Toluene : Lebih sulit dihilangkan dari kristal karena mempunyai titik didih yang lebih tinggi dibandingkan benzena, tetapi kurang karsinogenik dan kurang toksik.
- Karbon tetraklorida dan kloroform : Toksik
- Eter : Hindari penggunaannya jika memungkinkan.

Penggunaan pelarut campuran sering dipakai untuk mendapatkan pelarutan yang lebih optimum. Pelarut yang satu mempunyai kemampuan melarutkan yang tinggi dan dengan adanya pelarut yang kedua akan menurunkan kelarutan, sehingga campuran ini dapat dilakukan untuk menyeting proses pelarutan yang optimum.

2. Melarutkan zat padat (produk)

Jumlah pelarut yang digunakan hanya cukup untuk melarutkan zat padat (produk) dalam keadaan panas. Diberikan kelebihan volume untuk menghindari pengendapan pada kertas saring pada waktu penyaringan yang akan menutup pori-pori. Penggunaan air sebagai pelarut dapat dilakukan dengan pemanasan di bawah api. Penggunaan pelarut organik harus DIHINDARKAN dari NYALA API, biasanya dilakukan dalam labu alas bulat dan menggunakan pendingin air dan dilakukan dengan pemanas mantel.

3. Penghilangan pengotor berwarna dengan arang aktif

Pengotor berwarna pada produk biasanya dihilangkan dengan penambahan arang aktif pada larutan panas dari produk. Arang ini selain mengabsorpsi pengotor berwarna dapat juga menyerap resin dan partikel reaktif.

4. Penyaringan panas

Penyaringan dalam keadaan panas ini untuk menyaring pengotor-pengotor yang tidak larut. Proses penyaringan dilakukan dengan menggunakan corong yang

dilengkapi dengan kertas saring. Corong biasanya dipanaskan dulu untuk menghindari pengendapan kristal dalam corong.

5. Kristalisasi

Kristalisasi dilakukan dengan proses pendinginan bertahap larutan. Kristal akan segera terbentuk ketika suhu turun. Pendinginan yang mendadak dapat menimbulkan bentuk kristal yang kurang bagus dan mungkin dapat menyerap pelarut didalamnya (kasus khusus).

6. Pengumpulan kristal (murni) pertama melalui penyaringan vakum

Endapan kristal yang terbentuk disaring dengan bantuan penghisapan.

7. Pengeringan kristal

Kristal dikeringkan dalam kertas saring. Apabila kristal leleh dalam suhu 120°C , maka dapat dikeringkan dalam gelas arloji di atas penangas air.

8. Pengumpulan kristal kedua

Pengumpulan kristal ini dapat dilakukan dengan evaporasi (pengeringan) filtrat. Pengujian titik lebur dapat digunakan untuk melihat tingkat kemurniannya.

C. Pengukuran titik lebur.

Pengukuran titik lebur dapat digunakan dengan alat yang sederhana maupun digital. Alat yang sederhana biasanya berupa tabung yang dilengkapi termometer dan mempunyai bagian khusus yang akan dikenakan dengan sumber panas. Dengan alat digital, pengaturan suhu lebih mudah dan pengukurannya jadi lebih mudah.

Melting point Apparatus Stuart SMP10

Prosedur

1. Siapkan sampel dengan memasukkan sedikit sampel pada ujung pipa kapiler
2. Hidupkan alat. Tentukan suhu 'plateau' yang sesuai ($\pm 10^{\circ}\text{C}$ dibawah titik lebur sampel yang diharapkan) dengan menekan tombol 'set'. Pengaturan suhu menggunakan tombol panah (atas dan bawah).
3. Masukkan pipa kapiler yang sudah berisi sampel pada lubang yang tersedia pada alat.
4. Tekan 'start' hingga lampu 'heating' menyala dan tunggu hingga lampu 'plateau' menyala.

5. Bila suhu 'plateau' yang diinginkan sudah tercapai, tekan tombol 'start' sekali lagi. Pemanasan akan berjalan pelan 2°C per menit.
6. Amati titik lebur yang terjadi. Bila sudah didapatkan, tekan tombol 'stop'. Titik lebur merupakan suhu dimana sampel melebur semuanya.
7. Untuk memulai penentuan titik lebur selanjutnya, didinginkan hingga dibawah suhu 'plateau'.



D. Pemurnian cairan melalui destilasi

- Destilasi sederhana, dilakukan untuk menghilangkan pengotor yang tidak menguap dan akan tinggal dalam labu destilasi. Alat-alat yang digunakan antara lain, labu destilasi, adapter (stillhead), termometer, pendingin (condenser) dan penampung.
- Destilasi fraksial, dilakukan untuk memisahkan cairan-cairan yang mempunyai titik didih yang tidak berbeda jauh tapi cukup untuk dipisahkan melalui destilasi dengan pengaturan suhu. Dilakukan dengan penambahan pendingin tegak sehingga pengaturan suhu lebih mudah.
- Destilasi dengan pengurangan tekanan, dilakukan pada senyawa organik yang tidak dapat didestilasi dalam tekanan atmosfer.

E. Pemurnian zat dengan destilasi uap

Digunakan untuk memisahkan campuran cairan yang tidak saling campur (*immiscible*). Dasar penggunaan destilasi uap adalah tekanan uap suatu campuran (tidak saling campur) adalah jumlah dari masing-masing penyusun campuran tersebut.

$$P = P^0 A + P^0 B$$

Komposisi tekanan proporsional dengan jumlah mol komponen-komponen penyusunnya :

$$\frac{nA'}{nB'} = \frac{P^0 A}{P^0 B}$$

Komposisi diatas proporsional dengan bobot komponen-komponen penyusunnya:

$$\frac{WA}{WB} = \frac{nA' MA}{nB' MB} = \frac{P^0 A.MA}{P^0 B.MB}$$

Berdasarkan prinsip ini, maka tekanan uap campuran merupakan hasil penjumlahan tekanan penyusunnya, sehingga campuran akan mempunyai tekanan uap yang lebih rendah dengan konsekuensi titik didih/uap akan lebih rendah.

Penggunaan praktisnya adalah untuk menguapkan zat yang tidak campur dengan air, sehingga pengaliran uap air (100⁰C) pada sistem akan mengakibatkan campuran menguap pada suhu dibawah 100⁰C. Teknik ini akan mengurangi kerusakan zat oleh panas.

F. Pemisahan campuran tidak saling campuran dengan corong pisah

Teknik ini digunakan untuk memisahkan campuran yang tidak saling campur (sangat kecil bercampur). Secara umum digunakan dalam :

1. Isolasi senyawa organik (larutan) dari campuran hasil reaksi yang berair/mengandung air.
2. Cuci senyawa organik (larutan) dari kotoran hasil reaksi. (misalnya pencucian ester dengan sodium karbonat untuk menetralkan asam sulfat yang digunakan dalam esterifikasi)
3. Ekstraksi dengan reagen berair (aqueous reagent) pada lapisan organik (misalnya : ekstraksi metil salisilat) .
4. Penyucian dengan air untuk menghilangkan senyawa anorganik dari larutan organik.
5. Ekstraksi senyawa organik dari larutan berair.

DAFTAR MATERI YANG DIPRAKTIKUMKAN

No.	Nama Produk	Jumlah yang dibuat*	Pustaka (no.)
1.	Iodoform	R	4
2.	Paranitroasetanilid	½ R	2
3.	1-(4'-Metilfenil)-3-(3',4'-Dimetoksifenil)-2-Propenon	R	1,3
4.	Asam Asetil Salisilat	R	2

*)Lihat Prosedur dalam Petunjuk Praktikum ini

DAFTAR PUSTAKA:

1. Prasad Y.R, Rao, A.L, Rambabu, R, 2008, *Synthesis and Antimicrobial Activity of Some Chalcones Derivatives*, E-Journal Chemistry, vol 5 No 3 pp 461-466
2. Vishnoi, A.I., *Advanced Practical Organic Chemistry including Qualitative Organic Analysis*, Third Edition, Longman. Green and Co., London-New York-Toronto.
3. Vogel, A.I., 1996, *A Text-Book of Practical Organic Chemistry including Qualitative Organic Analysis*, Fifth Edition, Longman. Green and Co., London-New York-Toronto.
4. Wertheim, E., 1956, *Experiments in Organic Chemistry*, Third Edition, Mc GrawHill Book Co. Inc., New York-Toronto-London.

BAB IV

SINTESIS ASAM ASETIL SALISILAT

A. Tujuan percobaan:

Mengenal reaksi asetilasi

B. Alat dan Bahan

Alat :

- Labu alas bulat 250 ml
- Heating mantel
- Corong Buchner
- Pompa vakum
- Beker glass
- Batu didih
- Pendingin allihn
- Melting point tester

Bahan :

- Asam salisilat
- Asam asetat anhidrida
- Asam sulfat pekat
- Aquades
- Alkohol 96 %
- Besi (III) klorida
- Benzena

C. Cara kerja:

a. Tanpa media reaksi

Sintesis

- Masukkan 10 g asam salisilat dan 15 g (14 ml) asam asetat anhidrida ke dalam labu alas bulat 250 ml,
- Tambahkan 5 tetes asam sulfat pekat dan gojog hingga terjadi pencampuran sempurna.
- Panaskan labu pada suhu $\pm 50-60^{\circ}\text{C}$ sambil diaduk selama ± 15 menit.

Isolasi dan pemurnian:

- Dinginkan labu sambil tetap diaduk dan tambahkan 150 ml air dingin.
- Saring menggunakan corong Buchner dengan bantuan penghisapan (pompa vakum).
- Cuci kristal dengan air dingin hingga tidak bereaksi asam lagi.

- Lakukan rekristalisasi asam asetil salisilat dengan pelarut yang merupakan campuran alkohol 96% dan aquades (2:5).

Caranya:

tambahkan sedikit demi-sedikit campuran alkohol-air yang panas kepada kristal asam asetil salisilat hingga tepat larut, kemudian saring segera menggunakan corong Bucner panas (dengan bantuan penghisapan / pompa vakum) dan dinginkan filtratnya hingga diperoleh kristal berbentuk jarum. Saring kristal menggunakan corong *Buchner* dengan bantuan penghisapan (pompa vakum). Ambil sedikit kristal dan lakukan test dengan pereaksi besi (III) klorida.

- Keringkan kristal asam asetil salisilat yang diperoleh, timbang, dan tentukan titik leburnya.

b. Dengan media reaksi

Sintesis:

- Masukkan 5 g asam salisilat dan 35 ml benzena ke dalam labu alas bulat.
- Tambahkan 4 g asam asetat anhidrida dan beberapa butir batu didih. Hubungkan labu alas bulat dengan pendingin allihn.
- Panaskan campuran selama 1,5 jam, kemudian pendingin allihn dilepas.

Isolasi dan Pemurnian:

- Dinginkan labu dan aduk campuran dalam labu hingga terjadi pengendapan kristal asam asetil salisilat.
- Saring kristal menggunakan corong Buchner dengan bantuan penghisapan (pompa vakum). Cuci kristal dengan beberapa ml benzena, kemudian keringkan.
- Lakukan rekristalisasi asam asetil salisilat dengan campuran alkohol-air (1:3).

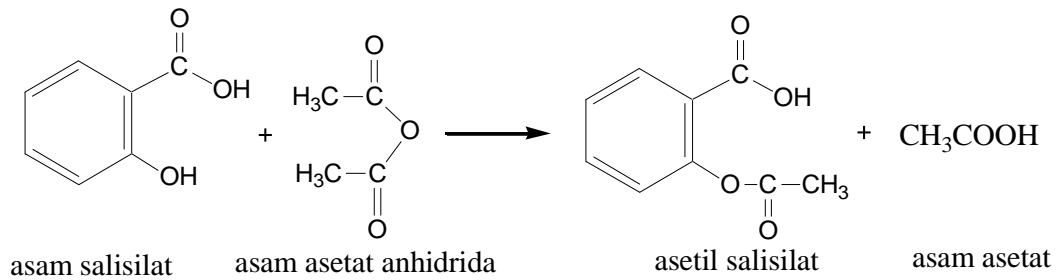
Caranya:

Tambahkan sedikit demi sedikit campuran alkohol-air panas kepada kristal hingga tepat larut, kemudian saring segera menggunakan

corong Buchner panas (dengan, bantuan penghisapan / pompa vakum) dan dinginkan filtratnya hingga diperoleh kristal berbentuk jarum. Saring kristal menggunakan corong Buchner dengan bantuan penghisapan (pompa vakum).

- Ambil sedikit kristal dan lakukan test dengan pereaksi besi (III) klorida.
- Keringkan kristal asam asetil salisilat yang diperoleh, kemudian timbang.

D. Reaksi



BAB V
SINTESIS

1-(4'-METILFENIL)-3-(3',4'-DIMETOKSIFENIL)-2-PROPEN-ON

A. Tujuan Percobaan :

Mengenal reaksi Kondensasi Claisen-Schmidt

B. Alat dan Bahan

Alat :

- Bekerglass 500 ml
- Labu alas bulat 500 ml
- Cawan petri
- Gelas ukur 10 ml
- Pompa vakum
- Corong Buchner
- Gelas Filtrasi
- Kertas saring
- Melting point tester
- Pot plastik
- Pendingin Allihn
- Gelas ukur 100 ml
- Batang pengaduk

Bahan :

- 4-metilasetofenon
- Etanol
- 3,4-dimetoksibenzaldehid
- Air es
- NaOH
- HCl

Cara kerja Asli

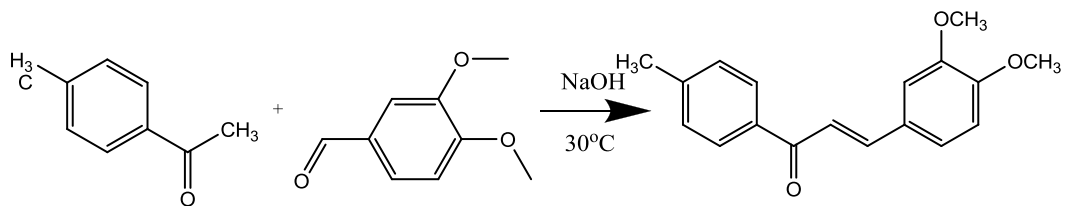
A mixture of substituted acetophenones (1,25 mmole) and aryl aldehydes (1,25 mmole) was stirred in ethanol (10 mL) and then an aqueous solution of sodium hydroxide 60% (1,2 mL) was added to it. The mixture was stirred in 6 hours room temperature and then it was poured into crushed ice and acidified with dilute hydrochloric acid. The chalcone derivative precipitates out as solid. Then it was filtered and crystallized from ethanol.

C. Cara kerja

1. Masukkan 4-metilasetofenon 0,1677 g dan 3,4-dimetoksibenzaldehid 0,2077 g ke dalam Bekerglass 500 ml

2. Tambahkan ke dalamnya etanol 10 ml dan aduk sampai homogen
3. Masukkan campuran kedalam ice bath sampai suhu 5 C
4. Campuran disitirer, dan ditambahkan 1,2 ml NaOH 60%
5. Setelah distirer 6 jam, dihasilkan produk berwarna kuning. Setelah itu tambahkan 50 ml air es, diaduk lalu dinetralkan dengan HCl 2 M sampai pH 7 didiamkan sampai memisah sekitar 1-2 jam.
6. Aduk perlahan-lahan, kristal 1(4'-bromofenil)-3-(3',4'-dimetoksifenil)-2-propen-on akan memisah dan biarkan selama 15 menit
7. Saring kristal dengan corong buchner, cuci beberapa kali dengan air es kemudian lakukan rekristalisasi dengan etanol 10 ml.
8. Keringkan di oven pada temperatur 30°C
9. Timbang dan tentukan titik leburnya

D. Reaksi



BAB VI

SINTESIS PARANITROASETANILID

A. Tujuan Percobaan :

Mengenal reaksi nitrasi

B. Alat dan Bahan

Alat :

- Erlenmeyer 250 ml
- Erlenmeyer 100 ml
- Cawan petri
- Gelas ukur 10 ml
- Pompa vakum
- Corong Buchner
- Gelas Filtrasi
- Kertas saring
- Melting point tester
- Pot plastik

Bahan :

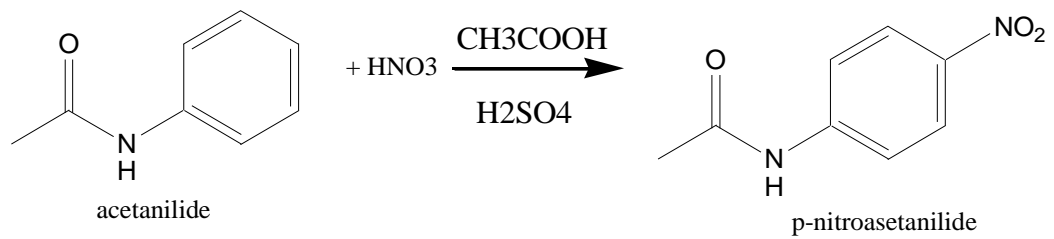
- Asetanilid
- Asam asetat glasial
- Asam sulfat pekat
- Asam nitrat pekat

C. Cara kerja

1. Masukkan 2 g asetanilid ke dalam labu erlenmeyer 100 ml
2. Tambahkan ke dalamnya 2 ml asam asetat glasial dan 4 ml asam sulfat pekat
3. Dinginkan labu dalam air es.
4. Campur hati-hati masing-masing 1 ml asam nitrat pekat dan asam sulfat pekat dalam labu erlenmeyer 100 ml kemudian dinginkan labu dalam air es
5. Teteskan campuran nitrasi ini tetes demi tetes ke dalam labu erlenmeyer yang berisi asetanilid sambil diaduk dan temperatur dijaga agar tidak lebih dari 10°C,
6. Apabila penetesan telah selesai keluarkan labu dari air es dan biarkan selama 1 jam
7. Setelah itu tuangkan ke dalam gelas beker 250 ml yang berisi 100 ml air dan beberapa potong es

8. Aduk perlahan-lahan, kristal p-nitroasetanilid akan memisah dan biarkan selama 15 menit
9. Saring kristal dengan corong buchner, cuci beberapa kali dengan air es kemudian lakukan rekristalisasi dengan etanol.
10. Keringkan di oven pada temperatur 100°C
11. Timbang dan tentukan titik leburnya.

D. Reaksi



BAB VII

SINTESIS IODOFORM

A. Tujuan percobaan:

Mengenal reaksi halogenasi α

B. Alat dan Bahan

Alat :

- Erlenmeyer 250 ml
- Erlenmeyer 100 ml
- Cawan petri
- Gelas ukur 10 ml
- Pompa vakum
- Corong Buchner
- Gelas Filtrasi
- Kertas saring
- Melting point tester
- Pot plastik

Bahan :

- Kalium Iodida
- Aquades
- Kapur klor
- Alkohol
- Natrium Hidroksida
- Aseton

C. Cara kerja

a. Dari aseton + kalium iodida + kapur klor

Sintesis

- Ke dalam labu alas datar (erlenmeyer), masukkan 6 g kalium iodida, 100 ml aquades, dan 2 ml aseton.
- Tambahkan tetes demi tetes sambil dikocok/digoyang-goyangkan larutan 5% kapur klor hingga satu tetes larutan kapur klor tidak memberikan endapan lagi.
- Dinginkan campuran selama ± 10 menit (dalam bak air es).

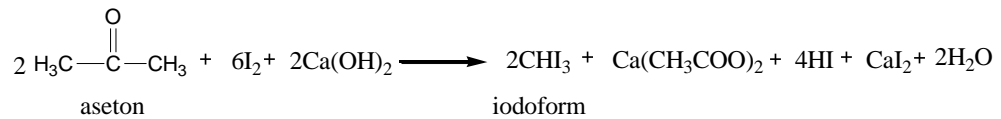
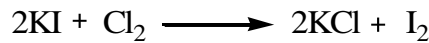
Isolasi dan pemurnian

- Saring campuran menggunakan corong Buchner dengan bantuan penghisapan (pompa vakum).
- Cuci kristal dengan *aquadest* hingga tidak bereaksi alkalis lagi.
- Lakukan rekristalisasi iodoform dengan alkohol.

Caranya:

Tambahkan sedikit demi sedikit alkohol panas kepada kristal iodoform hingga tepat larut, kemudian saring segera menggunakan corong Buchner panas (dengan bantuan penghisapan (pompa vakum) dan dinginkan filtratnya hingga diperoleh kristal kembali. Saring kristal menggunakan corong Buchner dengan bantuan penghisapan (pompa vakum)).

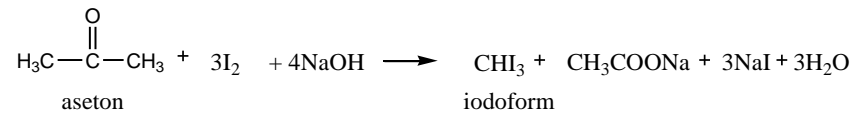
- Keringkan kristal yang diperoleh, timbang, dan tentukan titik leburnya.

Reaksi**b. Dari aseton + iodium + natrium hidroksida****Sintesis:**

- Ke dalam labu alas datar (erlenmeyer 200 ml), masukkan 5 g iodium dan 5 g aseton (BJ=0,79) dan 5 ml air suling dan kemudian dikocok. Tutup dengan Aluminium foil.
- Tambahkan sedikit demi sedikit larutan natrium hidroksida 2 N dengan terus menerus dikocok sampai larutan yang berwarna coklat berubah menjadi endapan kuning dari Iodoform (bila larutan sudah berwarna coklat muda, gunakan pipet tetes untuk menambahkan NaOH). Bila terjadi panas, dinginkan di bawah kran atau bungkus dengan lap basah.
- Setelah terjadi kristal kuning, segera encerkan dengan air sebanyak ± 125 ml.
- Saring endapan kuning dengan corong Buchner. Cuci endapan di atas corong dengan air sampai bebas NaOH.

Isolasi dan pemurnian :

- Tambahkan sedikit-demi sedikit alkohol panas 50 ml kepada kristal iodoform hingga tepat larut, kemudian saring segera menggunakan corong Buchner dengan bantuan penghisapan (pompa vakum) dan dinginkan filtratnya hingga diperoleh kristal kembali.
- Saring kristal menggunakan corong Buchner dengan bantuan penghisapan (pompa vakum)
- Keringkan kristal yang diperoleh di eksikator, timbang (hitung rendemen), dan tentukan titik leburnya.

Reaksi:

DAFTAR PUSTAKA

- Ahluwalia, V.K. and Aggarwal, R., 2001, *Organic Synthesis : Special Techniques*, Alpha Sciene International Ltd., Pangbourne, United Kingdom
- Cason, J., Rapoport, H., *Laboratory Text in Organic Chemistry*, 3 rd Edition, Prentice Hall Inc., New Jersey, 1970
- Cerfontain, H., *Practicum Organische Chemie*, Wolters-Nordhoff NV, Groningen, 1972
- Fessenden, R.J., Fessenden J.S., 1993, *Organic Laboratory Techniques*, Brooks/Cole Publishing Company Pacific Grove, California, USA.
- Olver, N.H., 1982, *Experimental Organic Chemistry*, School of Chemistry University of Melbourne.
- Perrin, D.D. and Armarego, W.L.F., 1989, *Purification of Laboratory Chemicals*, 3rd Ed., Pergamon Press plc, Oxford-New york-Frankfurt-Sao Paulo-Sydney-Tokyo-Toronto.
- Prasad Y.R, Rao, A.L, Rambabu, R, 2008, *Synthesis and Antimicrobial Activity of Some Chalcones Derivatives*, E-Journal Chemistry, vol 5 No 3 pp 461-466
- Reksohadiprojjo, M.S., 1976, *Kuliah dan Praktika Kimia Preparatif*, Toko Buku Gunung Agung, Yogyakarta.
- Sugihara, J.M., *Laboratory Exercises Organic Chemistry*, 4 th Edition, Burgess Publishing Company, Minnesota, 1969
- Vishnoi, A.I., *Advanced Practical Organic Chemistry*, 1 st Edition, Vikas Publishing Haouse, Pvt., Ltd., Sahibabas, 1979
- Vishnoi, A.I., *Advanced Practical Organic Chemistry including Qualitative Organic Analysis*, Third Edition, Longman. Green and Co., London-New York-Toronto.
- Vogel, A.1., 1956, *A Text-Book of Practical Organic Chemistry including Qualitative Organic Analysis*, Third Edition, Longman. Green and Co., London-New York-Toronto.

- Vogel, A.I., 1968, *A Text-Book of Practical Organic Chemistry including Qualitative Organic Analysis*, Third Edition, Longman. Green and Co., London-New York-Toronto.
- Wertheim, E., 1956, *Experiments in Organic Chemistry*, Third Edition, McGraw-Hill Book Co. Inc., New York-Toronto-London.
- Wilcox, C.F.Jr. and Wilcox, M.F., 1995, *Experimental Organic Chemistry : A Small-Scale Approach*, Prentice-Hall, Inc., New Jersey, USA

Lampiran.

LAPORAN HASIL PERCOBAAN

**Percobaan: Penambatan Molekuler menggunakan software Molegro
Virtual Docker**

Hasil Percobaan Penambatan Molekuler:

No.	Senyawa	Rerank Score	RMSD
1			
2			
3			

Hasil Percobaan Interaksi Ikatan Hidrogen:

No.	Senyawa	Gugus	Asam Amino
1			
2			
3			

LAPORAN HASIL PERCOBAAN

Percobaan

Sintesis

Reaksi kimia

.....
.....

Nama

BM :

M Berat :

Mol :

R Mol :

S Mol :

Perhitungan jumlah mol pereaksi

.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

Perhitungan berat produk teoritis

.....

Perhitungan Rendemen

.....

Kesimpulan Percobaan

(Rumus struktur)

.....

(Nama)

.....

Titik Lebur :

Berat rendemen :g (....%)

No. Percobaan :

Nama Praktikan :