

**STUDI HKSA TURUNAN BENZOILTIOUREA SECARA *IN SILICO*
SEBAGAI CALON OBAT SEDATIF HIPNOTIK
(4-Metilbenzoiltiourea; 4-metoksibenzoiltiourea; 4-butylbenzoiltiourea;
4-*t*-butylbenzoiltiourea; 3-trifluorometilbenzoiltiourea; dan
4-trifluorometilbenzoiltiourea)**

Michelle Anastasia Wenas, 2015

Pembimbing : (I) Siswandono, (II) Dini Kesuma

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian terhadap enam senyawa turunan benzoiltiourea, yaitu 4-metilbenzoiltiourea; 4-metoksibenzoiltiourea; 4-butylbenzoiltiourea; 4-*t*-butylbenzoiltiourea; 3-trifluorometilbenzoiltiourea; 4-trifluorometilbenzoiltiourea. Penelitian ini merupakan studi hubungan kuantitatif struktur aktivitas (HKSA) yang ditujukan untuk mengetahui hubungan antara perubahan struktur, sifat kimia fisika (lipofilik, elektronik, dan sterik) terhadap prediksi aktivitas (*rerank score*), toksisitas (LD-50), dan bioavailabilitas (F). Struktur dua dan tiga dimensi dibuat dengan menggunakan program *ChemBioDraw Ultra* 12.0 dan *ChemBio3D Ultra* 12.0. Program *ACD I-Lab* digunakan untuk mencari sifat kimia fisika serta nilai LD-50 dan bioavailabilitas. Program doking yang digunakan adalah *Molegro Virtual Docker* 5.0 dengan reseptor GABA_A kode 4-COF. Hasil doking menunjukkan 4-*t*-butylbenzoiltiourea memiliki nilai *rerank score* terbaik (-83.0588), lebih baik daripada senyawa pembanding (bromisoval) dan senyawa induk (benzoiltiourea). Semua turunan memenuhi persyaratan hukum lima Lipinski. Hasil analisis regresi enam turunan benzoiltiourea menggunakan program IBM[®] SPSS[®] *Statistic* 20 menunjukkan adanya hubungan linier antara perubahan struktur, sifat kimia fisika (elektronik dan sterik) dengan aktivitas dan toksisitas secara *in silico* sebagai calon obat sedatif hipnotik.

Kata Kunci: HKSA, benzoiltiourea, bromisoval, *in silico*, sedatif hipnotik