

**STUDI HKSA TURUNAN BENZOILTIOUREA SECARA
IN SILICO SEBAGAI CALON OBAT SEDATIF HIPNOTIK
(2,4-Diklorobenzoiltiourea, 3,4-diklorobenzoiltiourea,
4-bromobenzoiltiourea, 4-fluorobenzoiltiourea,
4-klorobenzoiltiourea, dan 4-nitrobenzoiltiourea)**

Dea Ristya, 2015

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

ABSTRAK

Telah dilakukan studi HKSA terhadap enam turunan benzoiltiourea (2,4-diklorobenzoiltiourea, 3,4-diklorobenzoiltiourea, 4-bromobenzoiltiourea, 4-fluorobenzoiltiourea, 4-klorobenzoiltiourea, dan 4-nitrobenzoiltiourea) secara *in silico* sebagai calon obat sedatif hipnotik. Penelitian ini dilakukan untuk memprediksi hubungan kuantitatif perubahan struktur aktivitas sifat kimia fisika (lipofilik, elektronik, sterik) terhadap prediksi aktivitas, toksisitas (LD50) dan bioavailabilitas (F) secara *in silico* dengan menggunakan program *Molegro Virtual Docker* (MVD) dan ACD-I/Lab. Simulasi *docking* dilakukan dengan reseptor GABA_A (kode: 4COF). Hasil *docking* menunjukkan bahwa nilai *rerank score* terbaik yaitu senyawa 4-nitrobenzoiltiourea (-79,5860) dibandingkan dengan senyawa pembanding bromisoval dan senyawa induk benzoiltiourea. Semua turunan diketahui memiliki sifat lipofilisitas yang memenuhi persyaratan hukum lima Lipinski. Hasil statistika SPSS disimpulkan bahwa terdapat hubungan bermakna antara perubahan struktur sifat kimia fisika turunan benzoiltiourea terhadap prediksi aktivitas (*rerank score*), bioavailabilitas (F) dan tidak ada hubungan bermakna terhadap prediksi toksisitas (LD50) secara *in silico* sebagai calon obat sedatif hipnotik.

Kata kunci : HKSA, Benzoiltiourea, *in silico*, sedatif hipnotik