

**PENGEMBANGAN SENYAWA HIBRID (4-
HEKSILFENIL)KARBONILTIOUREA-PIRAZOLOPIRIMIDIN :
STUDI SINTESIS, KARAKTERISASI, DAN STUDI *IN SILICO*
SEBAGAI *INHIBITOR DUAL* PI3K/mTOR**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar
Sarjana Farmasi**



TIA RAFIDA MAULADY

10016122150

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2026**

ABSTRAK

PENGEMBANGAN SENYAWA HIBRID (4- *HEKSILFENIL*)KARBONILTIOUREA-PIRAZOLOPIRIMIDIN : STUDI SINTESIS, KARAKTERISASI, DAN STUDI *IN SILICO* SEBAGAI *INHIBITOR DUAL PI3K/mTOR*

Tia Rafida Maulady

Program Studi S-1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Kanker merupakan penyakit yang menjadi salah satu penyebab utama kematian di dunia akibat pertumbuhan sel yang tidak terkendali. Tingginya kasus kanker serta efek samping dari terapi konvensional mendorong pengembangan senyawa antikanker baru yang lebih selektif dan memiliki toksisitas rendah. Penelitian ini bertujuan untuk mengembangkan senyawa hibrid (*4-heksilfenil*)karboniltiourea–pirazolopirimidin sebagai kandidat *inhibitor dual* PI3K/mTOR melalui pendekatan sintesis, karakterisasi, dan studi *in silico*. Sintesis dilakukan menggunakan metode refluks melalui pembentukan senyawa antara (*4-heksilfenil*)karboniltiourea yang selanjutnya direaksikan dengan pirazolopirimidin. Hasil sintesis diperoleh dalam bentuk padatan dengan kemurnian yang baik, ditunjukkan oleh jarak lebur sebesar 2°C serta noda tunggal pada uji KLT. Karakterisasi menggunakan spektrofotometri UV-Vis menunjukkan pergeseran panjang gelombang maksimum dari 259 nm menjadi 262 nm yang mengindikasikan peningkatan sistem konjugasi. Analisis FTIR menunjukkan adanya gugus fungsi khas seperti N–H, C=O, C=S, serta munculnya gugus C=N pada 1520 cm⁻¹ yang menandakan terbentuknya cincin pirazolopirimidin. Hasil spektrofotometri massa menunjukkan berat molekul sebesar 395,51 g/mol yang mendekati nilai teoritis 393,505 g/mol. Studi *in silico* menunjukkan bahwa senyawa memiliki interaksi yang stabil dengan reseptor PI3K dan mTOR serta berpotensi sebagai inhibitor ganda dengan afinitas yang baik. Dengan demikian, senyawa (*4-heksilfenil*)karboniltiourea–pirazolopirimidin berpotensi dikembangkan sebagai kandidat antikanker.

Kata kunci: Kanker, Studi *In Silico*, Tiourea, Pirazolopirimidin, PI3K/mTOR

Abstract

Cancer is a disease that is one of the main causes of death in the world due to uncontrolled cell growth. The high number of cancer cases and the side effects of conventional therapies encourage the development of new anticancer compounds that are more selective and have low toxicity. This study aims to develop a hybrid compound (4-hexylphenyl)carbonylthiourea-pyrazolopyrimidine as a candidate for dual PI3K/mTOR inhibitors through a synthesis approach, characterization, and in silico studies. Synthesis was carried out using the reflux method through the formation of an intermediate compound (4-hexylphenyl)carbonylthiourea which was then reacted with pyrazolopyrimidine. The synthesis results were obtained in solid form with good purity, indicated by a melting point of 2°C and a single spot in the TLC test. Characterization using UV-Vis spectrophotometry showed a shift in the maximum wavelength from 259 nm to 262 nm which indicated an increase in the conjugation system. FTIR analysis showed the presence of typical functional groups such as N-H, C=O, C=S, and the appearance of a C=N group at 1520 cm⁻¹, indicating the formation of a pyrazolopyrimidine ring. Mass spectrophotometry results showed a molecular weight of 395.51 g/mol, close to the theoretical value of 393.505 g/mol. In silico studies showed that the compound has a stable interaction with the PI3K and mTOR receptors and has the potential to act as a dual inhibitor with good affinity. Thus, the compound (4-hexylphenyl)carbonylthiourea-pyrazolopyrimidine has the potential to be developed as an anticancer candidate.

Keywords: Cancer, In Silico Studies, Thiourea, Pyrazolopyrimidine, PI3K/mTOR