

## INTISARI

Senyawa pirazolina memiliki rentang efek biologis yang luas dan telah dibuktikan secara eksperimental maupun klinik. Dalam beberapa penelitian, senyawa ini dapat diperoleh melalui reaksi antara hidrazin dengan senyawa  $\alpha$ ,  $\beta$ -aldehida atau keton tak jenuh. Dalam beberapa penelitian yang lain dilaporkan bahwa senyawa ini dapat dihasilkan dari suatu dibenzalaseton. Dengan perlakuan yang sama, diharapkan dapat diperoleh senyawa 5-fenil-1-formil-3-stiril-2-pirazolina dan 1,5-difenil-3-stiril-2-pirazolina. Karena struktur molekul teoretis senyawa tersebut sudah diketahui, profil farmakokinetik dan farmakodinamiknya dapat diidentifikasi dan diprediksi dengan metode QSAR yang dalam penelitian ini adalah *server online* ADMETlab 3.0, admetSAR 3.0, SwissTargetPrediction, dan Super-PRED. Penelitian ini bertujuan untuk melakukan sintesis senyawa 5-fenil-1-formil-3-stiril-2-pirazolina dan 1,5-difenil-3-stiril-2-pirazolina serta menganalisis sifat farmakokinetik dan farmakodinamik senyawa tersebut secara *in silico*.

Penelitian ini merupakan penelitian eksperimental melalui sintesis dua tahap, dimulai sintesis dibenzalaseton, dilanjutkan dengan reaksi antara hasil sintesis tahap pertama dengan hidrazin dalam kondisi refluks untuk menghasilkan senyawa 5-fenil-1-formil-3-stiril-2-pirazolina dan 1,5-difenil-3-stiril-2-pirazolina. Elusidasi struktur produk dilakukan dengan FTIR. Analisis sifat farmakokinetik dan farmakodinamik dilakukan secara *in silico* dengan skrining struktur kimia pada empat server online berupa ADMETlab, admetSAR, SwissTargetPrediction, dan Super-PRED.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa 5-fenil-1-formil-3-stiril-2-pirazolina dan 1,5-difenil-3-stiril-2-pirazolina dapat disintesis dengan persen hasil masing-masing 89,13% dan 66,27%. Berdasarkan prediksi profil farmakokinetik berbasis *in silico web server screening*, kedua senyawa memiliki profil absorpsi yang baik dan dapat diekskresi dengan cukup baik, namun memiliki daya distribusi yang kurang baik. Berdasarkan skrining farmakodinamik berbasis *web server target fishing*, diketahui bahwa senyawa 5-fenil-1-formil-3-stiril-2-pirazolina berpotensi sebagai obat antiinflamasi, antikanker, antidepresan, dan antineurodegenerasi. Sementara itu, senyawa 1,5-difenil-3-stiril-2-pirazolina berpotensi menjadi kandidat obat antiinflamasi, antikanker, diuretik, dan antianxietas. Meski demikian, masih dibutuhkan pengujian eksperimental lebih lanjut untuk mendukung temuan ini.

**Kata kunci:** pirazolina, dibenzalaseton, farmakokinetik, farmakodinamik, sintesis

## *ABSTRACT*

Pyrazoline compounds have broad biological activity that has been proven both experimentally and clinically. In some researches, this compound could be synthesized by reacting hydrazine with  $\alpha$ ,  $\beta$ -unsaturated aldehyde or ketone, while others reported synthesis of this compound from dibenzalacetone. By using the same treatment, it is believed that 1-formyl-5-phenyl-3-styryl-2-pyrazoline and 1,5-diphenyl-3-styryl-2-pyrazoline could be obtained. Because the theoretical structure of these compounds has been known, their pharmacokinetic and pharmacodynamic properties could be identified and predicted by QSAR method via ADMETlab 3.0, admetSAR 3.0, SwissTargetPrediction and Super-PRED. The purpose of this research is to synthesize 1-formyl-5-phenyl-3-styryl-2-pyrazoline and 1,5-diphenyl-3-styryl-2-pyrazoline compounds and analyze both their pharmacokinetic and pharmacodynamic profile in silico.

This is a two-phase synthesis experimental study, started with dibenzalacetone synthesis, followed by reaction of first phase product with hydrazine in reflux condition to produce 1-formyl-5-phenyl-3-styryl-2-pyrazoline and 1,5-diphenyl-3-styryl-2-pyrazoline compounds. Structure elucidation of the products is done with FTIR. Pharmacokinetic and pharmacodynamic profiles analysis of the products was done in silico by chemical structure screening on four online servers in the form of ADMETlab 3.0, admetSAR 3.0, SwissTargetPrediction and Super-PRED.

Results show that both 1-formyl-5-phenyl-3-styryl-2-pyrazoline and 1,5-diphenyl-3-styryl-2-pyrazoline could be synthesized with yield reaching 89.13% and 66.27% respectively. Based on in silico web browser screening pharmacokinetic profile prediction, both compounds have good absorption profile and decent elimination, but low distribution profile. Based on web server target fishing pharmacodynamic screening, compound 1-formyl-5-phenyl-3-styryl-2-pyrazoline has potency as antiinflammation, anticancer, antidepressant, and anti neuro degenerative drug. Meanwhile, compound 1,5-diphenyl-3-styryl-2-pyrazoline has potency to be antiinflammation, anticancer, diuretic, and antianxiety drug candidate. However, additional experimental tests are needed to support these findings.

**Keywords:** *pyrazoline, dibenzalacetone, pharmacokinetics, pharmacodynamics, synthesis*