

**STUDI IN SILICO DAN SINTESIS SENYAWA KOMPLEKS
BIS-(1-(4-DECYLBENZOYL)-3-METHYLTHIOUREA)
COBALT (III) SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana
Farmasi pada Program Studi S1 Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada**

MAULANA YUSUF ASSYIDIQ

31117025



**PROGRAM STUDI FARMASI
SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN
BAKTI TUNAS HUSADA TASIKMALAYA
2021**

ABSTRAK

Kanker merupakan sekelompok besar dari suatu penyakit, dimana terjadi pertumbuhan suatu sel abnormal didalam tubuh dan biasanya dapat bermetastasis sehingga dapat menjalar ke organ lain. Senyawa tiourea mampu memberikan aktivitas sitotoksik. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mensintesis, karakterisasi, dan interaksi senyawa hasil sintesis dengan reseptor target dengan metode docking menggunakan software AutodockTools 1.5.6. Senyawa kompleks *Bis-(1-(4-decylbenzoyl)-3-methylthiourea) Co (III)* dapat disintesis melalui reaksi antara logam $\text{Co}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ dengan ligan *1,4-decylbenzoyl-3-methylthiourea* yang dilarutkan dalam etanol dengan cara refluks pada suhu 150°C selama 8 jam. Bobot senyawa hasil sintesis adalah 54,5 mg. Karakterisasi senyawa kompleks meliputi jarak lebur sebesar $140\text{-}142^\circ\text{C}$, panjang gelombang maksimum 267 nm, dengan berat molekul 726,3925 g/mol, dan memberikan serapan Co-N pada bilangan gelombang $374,33\text{ cm}^{-1}$, Co-O pada bilangan gelombang $482,73\text{ cm}^{-1}$, dan Co-S pada bilangan gelombang $549,03\text{ cm}^{-1}$. Hasil docking senyawa kompleks yang disintesis memiliki interaksi yang baik dengan reseptor 2EUD yang lebih baik dari hydroxyurea dengan nilai energi bebas Gibbs (ΔG)/binding affinity sebesar -9,36 kcal/mol dan konstanta inhibisi (K_i) sebesar $136,66 \times 10^{-3}\ \mu\text{M}$. Hasil asam amino simulasi *Molecular Dynamics* dari senyawa Kompleks *Bis-(1-(4-Decylbenzoyl)-3-methylthiourea Cobalt (III)* yaitu asam amino SER A:610. Dapat disimpulkan, senyawa kompleks tersebut dapat dijadikan kandidat antikanker.

Kata Kunci : *binding affinity, docking, karakterisasi, senyawa kompleks, sintesis*

ABSTRACT

Cancer is a large group of diseases, where there is growth of an abnormal cell in the body and usually can metastasize so that it can spread to other organs. Thiourea compounds are able to provide cytotoxic activity. The purpose of this study was to synthesize, characterize, and interact with the synthesized compound with the target receptor using the docking method using AutodockTools 1.5.6 software. Bis-(1-(4-decylbenzoyl)-3-methylthiourea) Co (III) complex can be synthesized through the reaction between metal $\text{Co}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ with the ligand 1,4-decylbenzoyl-3-methylthiourea dissolved in ethanol with reflux method at 150°C for 8 hours. The weight of the synthesized compound was 54.5 mg. The characterization of complex compounds includes a melting range of $140\text{-}142^\circ\text{C}$, a maximum wavelength of 267 nm, with molecular weight 726,3925 g/mol, and provides absorption of Co-N at a wave number of 374.33 cm^{-1} , Co-O at a wave number of 482.73 cm^{-1} , and Co-S at a wave number of 482.73 cm^{-1} . wavenumber 549.03 cm^{-1} . The docking results of the synthesized complex compound have a good interaction with the 2EUD receptor which is better than hydroxyurea with a Gibbs free energy value (ΔG)/binding affinity of -9.36 kcal/mol and an inhibition constant (K_i) of $136.66 \times 10^{-3}\ \mu\text{M}$. The amino acid results of the Molecular Dynamics simulation of the Bis-(1-(4-Decylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III) complex compound, namely the amino acid SER A: 610. It can be concluded that the complex compound can be used as an anticancer candidate.

Keywords: *binding affinity, docking, characterization, complex compounds, synthesis*