

**MOLEKULAR *DOCKING*, PREDIKSI FARMAKOKINETIK DAN
SINTESIS KOMPLEKS *BIS - 1 - ((4 - HEPTYLBENZOYL) -3 -
METHYLTHIOUREA) COBALT (III)* SEBAGAI KANDIDAT
ANTI-KANKER**

SKRIPSI

**Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk menempuh Ujian Sarjana
pada Program Studi S-1 Farmasi**

TIKA RAHMAWATI

31117047



**PROGRAM STUDI S-1 FARMASI
SEKOLAH TINGGI KESEHATAN
BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA**

2021

ABSTRAK

Molekular *Docking*, Prediksi Farmakokinetik Dan Sintesis Kompleks *Bis-1-((4-Heptylbenzoyl)-3-Methylthiourea) Cobalt (III)* Sebagai Kandidat Antikanker

Tika Rahmawati

S1 Farmasi, STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Dengan adanya teknologi lebih maju mempermudah dalam merancang pengobatan baru yang bertujuan untuk mendapatkan obat baru dengan aktivitas lebih baik serta mempunyai toksisitas yang lebih rendah melalui modifikasi struktur. Berdasarkan data Riset Kesehatan Dasar pada tahun 2013, prevalensi kanker di Indonesia cukup tinggi, yaitu 1,4 per 1000 penduduk. Penelitian ini dilakukan untuk mencari senyawa baru sebagai kandidat antikanker dari senyawa kompleks *Bis-1-((4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III)*, mengetahui sifat farmakokinetik dari senyawa kompleks hasil sintesis dibandingkan senyawa awalnya dan interaksinya terhadap reseptor kanker *Ribonukleotida Reduktase*. Senyawa kompleks *Bis-1-((4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III)* disintesis dari reaksi antara senyawa *1-(4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea* dengan logam cobalt (III) menggunakan metode *Refluks*. Hasil sintesis kemudian dilakukan uji kemurnian dengan HSM dan KLT. Lalu dikarakterisasi menggunakan spektrofotometri UV-Vis, Spektrofotometri FTIR dan spektroskopi Massa. Terakhir di uji secara *in silico* dan sifat farmakokinetiknya dengan uji PreADMET. Dengan % *yield* sebesar 83,52%. Dimana dari hasil uji PreADMET didapatkan bahwa senyawa kompleks *Bis-1-((4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III)* memiliki sifat farmakokinetik yang lebih baik dibandingkan senyawa *1-(4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea*. Hasil uji *in silico* serta *molecular docking* senyawa kompleks *Bis-1-((4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III)* diprediksi dapat berinteraksi dengan reseptor *ribonukleotida reductase* dengan hasil yang stabil serta memiliki aktivitas yang lebih baik dari pada senyawa pembanding *hydroxyurea*.

Kata kunci: *Thiourea, logam cobalt (III), antikanker, sintesis kompleks, study in silico*

Abstract

With the existence of more advanced technology, it is easier to design new treatments that aim to get new drugs with better activity and have lower toxicity through structural modifications. Based on data from Basic Health Research in 2013, the prevalence of cancer in Indonesia is quite high, namely 1.4 per 1000 population. This research was conducted to find new compounds as anticancer candidates from the Bis-1-((4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III) complex compound, to determine the pharmacokinetic properties of the synthesized complex compound compared to the initial compound and its interaction with cancer receptors Ribonucleotides. Reductase. The complex compound Bis-1-((4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III) was synthesized from the reaction between the compound 1-(4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea and metallic cobalt (III) using the Reflux method. The results of the synthesis were then tested for purity by HSM and TLC. Then characterized using UV-Vis spectrophotometry, FTIR Spectrophotometry and Mass spectroscopy. Finally, it was tested *in silico* and its pharmacokinetic properties were tested by PreADMET test. With % yield of 83.52%. Where from the results of the PreADMET test, it was found that the complex compound Bis-1-((4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III) had better pharmacokinetic properties than the compound 1-(4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea. The results of the *in silico* test and molecular docking of Bis-1-((4-heptylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III) complex compounds are predicted to interact with ribonucleotide reductase receptors with stable results and have better activity than the comparison compound hydroxyurea.

Keywords: *Thiourea, cobalt(III) metal, anticancer, complex synthesis, study in silico*

