

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI IN SILICO
1-(4-DECYLBENZOYL)-3-METHYLTHIOUREA SEBAGAI
SIRT1 INHIBITOR**

SKRIPSI

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

MOCHAMAD FAJAR DELIAZ

31117174



**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
SEKOLAH TINGGI ILMU KESEHATAN
BAKTI TUNAS HUSADA TASIKMALAYA
2021**

ABSTRAK

Senyawa *1-(4-Decylbenzoyl)-3-Methylthiourea* dapat disintesis melalui reaksi antara *N-Methylthiourea* dengan *4-Decylbenzoyl Chloride* yang dilarutkan dalam tetrahydrofuran dengan cara refluks pada suhu 75°C selama 5 jam. Karakterisasi dilakukan dengan kromatografi lapis tipis dan instrument Hot Stage Microscopy, Spektrofotometri UV-Visibel, Spektrofotometri Inframerah dan Spektrometri Massa. 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. Bobot senyawa hasil sintesis adalah 863,8 mg, nilai Rf pada fase gerak kloroform : etanol (9:1) sebesar 0,6 dan pada fase gerak n-heksan:etanol:etil asetat (1:2:3) sebesar 0,5, jarak lebur sebesar 52-54°C, panjang gelombang maksimum 295 nm dan memberikan serapan -NH pada 3241,67 cm⁻¹, C=O pada 1656,46 cm⁻¹, C=C aromatis pada 1556,43 cm⁻¹, dan C-H pada 3161,23 cm⁻¹, berat molekul sebesar 335,225 g/mol. Interaksi dan afinitas senyawa *1-(4-Decylbenzoyl)-3-Methylthiourea* terhadap reseptor 4I5I melalui simulasi *docking*. Validasi *docking* didapatkan nilai RMSD 0,41 Å Simulasi docking didapatkan nilai *binding affinity* -9,16 dan konstanta inhibisi 193,82 nM. Hasil simulasi dinamika molekul selama 20 ns menggunakan AMBER 16 menunjukkan bahwa senyawa *1-(4-Decylbenzoyl)-3-Methylthiourea* memiliki kestabilan interaksi yang tidak lebih baik terhadap reseptor 4I5I dibandingkan dengan cambinol.

Kata kunci: *1-(4-Decylbenzoyl)-3-Methylthiourea*, SIRT1, docking, sintesis.

ABSTRACT

Compound *1-(4-Decylbenzoyl)-3-Methylthiourea* can be synthesized by reaction between *N-Methylthiourea* and *4-Decylbenzoyl Chloride* dissolved in tetrahydrofuran by reflux at 75°C for 5 hours. Characterization was carried out using thin layer chromatography and instruments Hot Stage Microscopy, UV-Visible Spectrophotometry, Infrared Spectrophotometry and Mass Spectrometry. 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. The weight of the synthesized compound was 863.8 mg, the Rf value in the mobile phase of chloroform: ethanol (9:1) was 0.6 and in the mobile phase of n-hexane: ethanol: ethyl acetate (1:2:3) was 0.5, the melting range is 52-54°C, the maximum wavelength is 295 nm and gives -NH absorption at 3241.67 cm⁻¹, C=O at 1656.46 cm⁻¹, C=C aromatic at 1556.43 cm⁻¹, and CH at 3161.23 cm⁻¹, a molecular weight of 335.225 g/mol. The interaction and affinity of the compound *1-(4-Decylbenzoyl)-3-Methylthiourea* to the 4I5I receptor through docking simulation. Docking validation obtained an RMSD value of 0.41 dock The docking simulation obtained a binding affinity value of -9.16 and an inhibition constant of 193.82 nM. Molecular dynamics simulation results for 20 ns using AMBER 16 showed that the compound *1-(4-Decylbenzoyl)-3-Methylthiourea* had no better interaction stability with 4I5I receptors than cambinol.

Keywords: *1-(4-Decylbenzoyl)-3-Methylthiourea*, SIRT1, docking, syntesis.