

**PREDIKSI FARMAKOKINETIKA, *MOLECULAR DOCKING* DAN
SINTESIS SENYAWA KOMPLEKS *BIS-* (1- (4-*HEXYLBENZOYL*) -3-
METHYLTHIOUREA) *COBALT (III)* SEBAGAI KANDIDAT
ANTIKANKER**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana pada
Program Studi S-1 Farmasi
STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

MAILA DWI ROHMAH

31117170



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

2021

**PREDIKSI FARMAKOKINETIKA, MOLEKULAR DOCKING DAN
SINTESIS SENYAWA KOMPLEKS *BIS-* (1- (4-*HEXYLBENZOYL*) -3-
METHYLTHIOUREA) *COBALT (III)* SEBAGAI KANDIDAT
ANTIANKER**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar sarjana pada
Program Studi S-1 Farmasi
STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

MAILA DWI ROHMAH

31117170

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

ABSTRAK

Prediksi Farmakokinetika, *Molecular Docking* Dan Sintesis Senyawa Kompleks Bis- (1- (4-Hexylbenzoyl) -3-Methylthiourea) Cobalt (Iii) Sebagai Kandidat Antikanker

Maila Dwi Rohmah

S1 Farmasi, STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Sintesis senyawa kompleks $\text{Co}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ dengan ligan 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea bertujuan untuk mensintesis, karakterisasi, studi *in silico* dan prediksi farmakokinetika dari senyawa kompleks. Instrument yang digunakan untuk karakterisasi adalah *Hot Stage Microscopy*, Spektrofotometri UV-Visibel, Spektrofotometri Inframerah dan Spektrometri Massa. Sintesis senyawa kompleks Bis- (1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III) dapat disintesis dengan mencampurkan logam dan ligan yang dilarutkan dalam etanol dengan pemanasan pada suhu 150°C. Bobot senyawa hasil sintesis adalah 50 mg jarak lebur sebesar 53-55°C, panjang gelombang maksimum 267,62 nm, bilangan gelombang 533,72 cm^{-1} , 482,4 cm^{-1} dan 354 cm^{-1} serta berat molekul yang didapat sebesar 613,76 g/mol. Interaksi dan afinitas senyawa kompleks terhadap reseptor ribonukleotida reduktase melalui simulasi *docking*. Simulasi *docking* didapatkan nilai *binding affinity* -8,70 dan konstanta inhibisi 0,42276 μM . Berdasarkan penelitian, dapat disimpulkan bahwa senyawa kompleks Bis- (1-(4-hexylbenzoyl) -3-Methylthiourea) Cobalt (III) memiliki aktivitas penghambatan yang lebih baik terhadap reseptor ribonukleotida reduktase jika dibandingkan dengan pembanding yaitu *hydroxyurea*.

Kata Kunci : 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea, antikanker, $\text{Co}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, *docking*, sintesis

Abstract

Synthesis of complex compounds $\text{Co}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ with ligands 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea aims to synthesize, characterize, study in silico and pharmacokinetic predictions of complex compounds. Instruments used for characterization are Hot Stage Microscopy, UV-Visibel Spectrophotometry, Infrared Spectrophotometry and Mass Spectrometry. The synthesis of bis- (1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea) Cobalt (III) complex compounds can be synthesized by mixing metals and ligands dissolved in ethanol by heating at 150°C. The weight of the synthesis compound is 50 mg melting distance of 53-55°C, maximum wavelength of 267.62 nm, wave number 533.72 cm^{-1} , 482.4 cm^{-1} and 354 cm^{-1} and molecular weight obtained by 613.76 g/mol. Interaction and affinity of complex compounds against reductase ribonucleotide receptors through docking simulations. Docking simulation obtained binding affinity value -8.70 and inhibition constant 0.42276 μM . Based on research, it can be concluded that bis-complex compound (1-(4-hexylbenzoyl) -3-Methylthiourea) Cobalt (III) has better inhibitory activity against reductase ribonucleotide receptors when compared to the comparison of hydroxyurea.

Keywords: 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea, anticancer, $\text{Co}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, *docking*, *synthesis*