

**STUDI KOMPUTASI DAN SINTESIS SENYAWA KOMPLEKS
BIS-(1-(4-DECYLBENZOYL)-3-METHYLTHIOUREA) IRON (III)
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

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

**CINDY DELFIANA TANOD
31117007**



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

ABSTRAK

STUDI KOMPUTASI DAN SINTESIS SENYAWA KOMPLEKS *BIS-(1-(4-DECYLBENZOYL)-3-METHYLTHIOUREA) IRON (III)* SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER

Cindy Delfiana Tanod, Ruswanto, Nur Rahayuningsih

Department of Pharmacochemistry, STIKes Bakti Tunas Husada, Jl. Cilolohan No.36,
Tasikmalaya 46115, Indonesia

Abstrak

Thiourea banyak diteliti dan dikembangkan sebagai obat antikanker karena memiliki atom -O, -S, dan -N. Thiourea dapat berikatan dengan ion logam menghasilkan senyawa kompleks yang lebih stabil dan telah terbukti memberikan aktivitas antikanker lebih baik dibandingkan *hydroxyurea* terhadap enzim ribonukleotida reductase. Senyawa *1-(4-decylbenzoyl)-3-methylthiourea* dengan ion logam Fe (III) disintesis menggunakan pelarut etanol p.a dengan metode *reflux* pada suhu 75°C selama ± 8 jam menghasilkan 58,22 mg dengan %yield 64%. Kemudian dilakukan uji kemurnian menggunakan *Hot Stage Microscopy*. Lalu dilakukan penentuan panjang gelombang maksimum menggunakan spektrofotometer UV-Vis, memprediksi gugus fungsi dengan spektroskopi IR dan menentukan massa molekul senyawa kompleks menggunakan spektrometri massa. *Molecular Docking*, *molecular dynamics* dan PreADMET dilakukan pada senyawa kompleks *Bis-(1-(4-decylbenzoyl)-3-methylthiourea Iron (III))* terhadap reseptor ribonukleotida reductase dengan kode 2EUD dengan dibandingkan dengan obat *hydroxyurea*. Hasil *Molecular docking* menunjukkan bahwa senyawa kompleks dapat berinteraksi dan memiliki aktivitas lebih baik dibanding *hydroxyurea* terhadap reseptor ribonukleotida reductase.

Kata kunci: Thiourea, antikanker, Fe (III), sintesis, *in silico*

Abstrak

Thiourea is widely researched and developed as an anticancer drug because it has -O, -S, and -N atoms in it. Thiourea can bind with metal ions to produce complex compounds that are more stable and have been shown to provide better anticancer activity than hydroxyurea against ribonucleotide reductase enzymes. Compound 1-(4-decylbenzoyl)-3-methylthiourea with metal ion Fe (III) will be synthesized using ethanol p.a with reflux method at 75°C for ± 8 hours, produce 58.22 mg with %yield 64%. Then The purity test was carried out using hot stage microscopy. The maximum wavelength was determined using a UV-Vis spectrophotometer, predicted the functional group by IR spectroscopy and determined the molecular mass of the complex compound using mass spectrometry. Molecular Docking, molecular dynamics and PreADMET were performed on the Bis-(1-(4-decylbenzoyl)-3-methylthiourea Iron (III)) to the ribonucleotide reductase receptor coded 2EUD in comparison with the drug hydroxyurea. The results of molecular docking showed that complex compounds could interact and has better activity than hydroxyurea against ribonucleotide reductase receptors.

Keywords: Thiourea, anticancer, Fe (III), synthesis, *in silico*