

**PREDIKSI FARMAKOKINETIK, STUDI KOMPUTASI DAN
SINTESIS DARI SENYAWA KOMPLEKS $[C_{30}H_{50}FeN_4O_4S_2]^{4+}$
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana pada
Program Studi S-1 Farmasi**

AMIRA NADITA QUROTTUN A'IN

31117003



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

2021

ABSTRAK

Prediksi Farmakokinetik, Studi Komputasi dan Sintesis Dari Senyawa Kompleks $[C_{30}H_{50}FeN_4O_4S_2]^{4+}$ Sebagai Kandidat Antikanker

Amira Nadita Qurottun A'in, Ruswanto, Gatut Ari Wardani

Program Studi Farmasi, Sekolah Tinggi Ilmu Kesehatan Bakti Tunas Husada Tasikmalaya, Jl. Cilolohan No.36, 46115, Tasikmalaya, Indonesia

Email: amiranadita@gmail.com

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mensintesis dan karakterisasi, prediksi farmakokinetik serta molekuler *docking* senyawa kompleks. Sintesis logan Fe (III) dengan 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea dengan pelarut etanol menggunakan refluks pada suhu 150°C selama 8 jam. *Hot stage Microscopy*, Spektrofotometr Uv-Vis, Spektrofotometri Inframerah dan Spektrofotometri Massa digunakan untuk karakterisasi senyawa kompleks. Berat senyawa kompleks sebesar 0,0531 g. Kemurnian senyawa kompleks telah diuji dengan menggunakan penentuan jarak lebur dan diperoleh jarak lebur berkisar 50°-52°C. Hasil karakterisasi senyawa kompleks $[C_{30}H_{50}FeN_4O_4S_2]^{4+}$ memiliki panjang gelombang maksimum 267,0 nm dan memberikan serapan vibrasi gugus Fe-O pada bilangan gelombang 558,4 cm^{-1} dan serapan gugus Fe-N pada bilangan gelombang 476,43 cm^{-1} , berat molekul menggunakan spektrofotometri massa adalah 651,146 g/mol. Proses molecular *docking* dilakukan menggunakan *software AutodockTools-1.5.6.6* dan menunjukkan senyawa kompleks $[C_{30}H_{50}FeN_4O_4S_2]^{4+}$ memiliki interaksi lebih baik daripada 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea dengan nilai energy binding afinitas (ΔG) sebesar -12,66 kkal/mol dan konstanta inhibisi (K_i) sebesar $52,85 \times 10^{-5} \mu M$. Dapat disimpulkan bahwa senyawa kompleks tersebut dapat dijadikan kandidat antikanker.

Kata kunci: Kompleks, Docking, Logam Fe (III), Sintesis, 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea

ABSTRACT

The aims of this research were the synthesis and characterization, the pharmacokinetic and toxicity prediction, and molecular docking of the complex. The synthesis of Fe (III) metal with the 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea in ethanol by reflux at 150°C for 8 hours. The Hot Stage Microscopy, UV-Visible Spectrophotometry Infrared Spectrophotometry, and Mass Spectrophotometry were used to characterize the complex. The weight of the complex was 0.0531 g. The purity of the complex has been tested using the determination of melting point and obtained a melting point range was 50°-52°C. The Characteristics of the $[C_{30}H_{50}FeN_4O_4S_2]^{4+}$ complex have a maximum wavelength of 267,0 nm and provide absorption of Fe-O vibrations at wavenumbers 558,4 cm^{-1} and Fe-N vibrations at wavenumbers 476,43 cm^{-1} , the m/z complex of spectrophotometry mass was 651,146 g/mol. The molecular docking process was performed using AutodockTools-1.5.6 software and it showed that the $[C_{30}H_{50}FeN_4O_4S_2]^{4+}$ complex could interact with ribonucleotide reductase enzyme and it has better interaction than the 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea with the binding affinity energy (ΔG) of -12,66 kcal/mole and the constant inhibition (K_i) of $52,85 \times 10^{-5} \mu M$. It can be concluded that the complex compound can be used as an anticancer candidate.

Keywords: Complex, Docking, Fe (III Metal), Synthesis, 1-(4-hexylbenzoyl)-3-methylthiourea.

HALAMAN PENGESAHAN


Skripsi/Tugas akhir ini diajukan oleh :
Nama : Amira Nadita Qurottun A'in
NIM : 31117003
Program Studi : S-1 Farmasi
Judul Skripsi/Tugas Akhir : Prediksi Farmakokinetik, Studi Komputasi dan Sintesis dari Senyawa Kompleks $[C_{30}H_{50}FeN_4O_4S_2]^{4+}$ sebagai Kandidat Antikanker

Telah berhasil dipertahankan di hadapan Dewan Penguji, telah diperbaiki sesuai dengan saran dari tim penguji serta diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

**Pada Program Studi Farmasi
STIKes Bakti Tunas Husada Tasikmalaya**

DEWAN PENGUJI

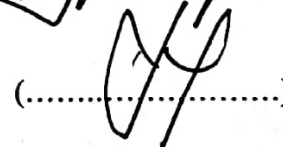
Pembimbing I : Dr. Ruswanto, M.Si


(.....)

Pembimbing II : Gatut Ari Wardani, M.Sc


(.....)

Penguji : Dra. apt. Hj. Lilis Tuslinah, M.Si


(.....)

Ditetapkan di : Tasikmalaya

Tanggal : 30 Juli 2021