

**STUDI KOMPUTASI KOMPLEKS LOGAM BESI (III) TIOUREA  
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

**SKRIPSI**



**RIFKI ALIYUSIDIK**

**NIM 31118050**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA  
OKTOBER 2022**

# STUDI KOMPUTASI KOMPLEKS LOGAM BESI (III) -TIOUREA SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER

Rifki Aliyusidik<sup>1\*</sup>, Ruswanto<sup>2</sup>, HENDY SUHENDY<sup>3</sup>

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada, Tasikmalaya, Indonesia

## Abstrak

Kanker merupakan sel abnormal yang dapat bermetastasis dan menjalar ke organ lain. Pada penelitian sebelumnya tiourea diketahui memiliki aktivitas sebagai antikanker secara *in silico* dan *in vitro*. Tujuan penelitian untuk membuat senyawa kompleks besi (III)-tiourea secara *in silico* serta mengetahui profil farmakokinetik dan toksisitas. Metode yang digunakan ialah studi farmakokinetik dan toksisitas, *molecular docking* dan simulasi *molecular dynamic*. Pengujian delapan belas senyawa kompleks besi(III)-tiourea terhadap profil farmakokinetik dan toksisitas terdapat delapan senyawa yang memiliki absorpsi dan distribusi yang baik, sedangkan hasil toksisitas menunjukkan bahwa ada sebelas senyawa diprediksi tidak toksik. Hasil *molecular docking* dari ke delapan belas senyawa kompleks logam besi (III)-tiourea yang memiliki nilai energi bebas ( $\Delta G$ ) yang rendah, antara lain tiga senyawa pada reseptor kanker prostat (1T7F), tujuh belas senyawa pada reseptor kanker paru (2ITO) dan delapan belas senyawa pada reseptor kanker payudara (3ERT). Hasil *molecular dynamic* terbaik senyawa *Bis-(3-methyl-1-(3-nitrobenzoyl) thiourea)* besi-(III) pada reseptor kanker prostat (1T7F) selama 50 ns menunjukkan nilai RMSD dan RMSF yang rendah dan stabil. Senyawa kompleks besi (III)-tiourea memiliki profil farmakokinetik yang baik bahwa *Bis-(3-methyl-1-(3-nitrobenzoyl) thiourea)* besi (III) diprediksi menjadi kandidat yang paling berpotensi dengan afinitas dan kestabilan yang lebih baik namun memiliki toksisitas yang *mutagenic*.

Kata Kunci: Kanker Prostat. Kanker Paru. Kanker Payudara. Studi komputasi. Kompleks Besi (III)-tiourea.

## Abstract

Cancer is an abnormal cell that can metastasize and spread to other organs. In previous studies, thiourea was known to have anticancer activity *in silico* and *in vitro*. The purpose of the study was to make a complex compound of iron (III)-thiourea *in silico* and to determine the pharmacokinetic profile and toxicity. The methods used are pharmacokinetics and toxicity studies, *molecular docking* and *molecular dynamic* simulation. Testing eighteen iron (III)-thiourea complex compounds against pharmacokinetic profiles and toxicity there were eight compounds that had good absorption and distribution, while toxicity results showed that there were eleven compounds predicted to be non-toxic. Molecular *docking* results from the eighteen compounds of the ferrous metal complex (III)-thiourea which have a low free energy value ( $\Delta G$ ), including three compounds at the prostate cancer receptor (1T7F), seventeen compounds at the lung cancer receptor (2ITO) and eighteen compounds at the breast cancer receptor (3ERT). The best *molecular dynamic* results of *bis-(3-methyl-1-(3-nitrobenzoyl) thiourea)* iron-(III) compounds at prostate cancer receptors (1T7F) for 50 ns showed low and stable RMSD and RMSF values. The complex compound iron (III)-thiourea has a good pharmacokinetic profile that *Bis-(3-methyl-1-(3-nitrobenzoyl) thiourea)* iron (III) is predicted to be the most potential candidate with better affinity and stability but has *mutagenic* toxicity.

Keywords: Kanker Prostate. Lung Cancer. Breast Cancer. Computational studies. Iron Complex (III)-thiourea.