

**SINTESIS DAN STUDI KOMPUTASI SENYAWA KOMPLEKS  
*BIS-(1-(3-CHLOROBENZOYL)-3-PHENYLTHIOUREA)*  
*COBALT(III)* SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

**SKRIPSI**

**Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk memperoleh gelar  
Sarjana**



**NISA USWATUN KHASANAH**

**31119169**

**PROGRAM STUDI FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA  
AGUSTUS 2023**

## ABSTRAK

### SINTESIS DAN STUDI KOMPUTASI SENYAWA KOMPLEKS *BIS-(1-(3-CHLOROBENZOYL)-3-PHENYLTHIOUREA) COBALT(III)* SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER

Nisa Uswatun Khasanah

Program Studi S-1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada

#### Abstrak

Kanker merupakan penyakit yang ditandai dengan terbentuknya sel yang berkembang secara tidak normal sehingga terjadi penumpukan dan dapat menyebabkan benjolan. Efek toksisitas yang ditimbulkan pada senyawa obat antikanker menjadi masalah dalam pengobatan kanker dengan cara kemoterapi. Maka dari itu perlu dicari alternatif lain untuk mengatasi kanker. Tujuan dari penelitian ini yaitu mensintesis, karakterisasi, serta interaksi senyawa hasil sintesis dengan reseptor target melalui metode *docking*. Perolehan % yield hasil sintesis sebesar 36,2%, Karakterisasi senyawa kompleks ditandai dengan adanya noda tunggal pada plat KLT dan jarak lebur yang sempit (135-137°C), Panjang gelombang maksimum 273 nm, dengan berat molekul sebesar 652 g/mol, memberikan serapan Co-O dan Co-S pada daerah bilangan gelombang 498  $cm^{-1}$  dan 604  $cm^{-1}$ . Hasil *docking* menunjukkan bahwa senyawa kompleks *Bis-(1-(3-Chlorobenzoyl)-3-Phenylthiourea) Cobalt(III)* memiliki aktivitas terbaik pada protein target kanker payudara (PDB 3ERT) dengan perolehan nilai *binding affinity* sebesar -9,40 kcal/mol, lebih rendah dibanding senyawa pembanding (Cisplatin) serta memiliki profil farmakokinetik yang lebih baik dibanding Cisplatin. Penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa kompleks *Bis-(1-(3-Chlorobenzoyl)-3-Phenylthiourea) Cobalt(III)* memiliki potensi sebagai kandidat antikanker.

**Kata Kunci** : sintesis, senyawa kompleks, karakterisasi, studi komputasi

## **Abstract**

*Cancer is a disease characterized by the formation of cells that develop abnormally causing accumulation and can cause lumps. The toxic effects of anticancer drug compounds are a problem in the treatment of cancer by means of chemotherapy. Therefore it is necessary to look for other alternatives to overcome cancer. The purpose of this research is to synthesize, characterize, and interact with the target receptor compounds through the docking method. Obtained % yield of synthesis results of 36,2 %, The characterization of complex compounds is characterized by the presence of a single stain on the TLC plate and a narrow melting distance (135-137°C), The maximum wavelength is 273 nm, with a molecular weight of 652 g/mol, giving Co- O and Co-S in the wave number area 498 and 604  $\text{cm}^{-1}$  The docking results showed that the complex compound Bis-(1-(3-Chlorobenzoyl-3-Phenylthiourea) Cobalt(III) had the best activity on breast cancer target protein (PDB 3ERT) with a binding affinity value of -9.40 kcal/mol, lower than the reference compound (Cisplatin). This study showed that the complex compound Bis-(1-(3-Chlorobenzoyl-3-Phenylthiourea) Cobalt(III) has potential as an anticancer candidate.*

**Keywords:** *synthesis, complex compounds, characterization, computational studies*