

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN UJI *IN SILICO* 3-(4-  
HEXYLBENZOYL)-1-β-((4-HEXYLPHENYL)FORMAMIDO)  
METHANETHIOYL}AMINO)PROPYL]THIOUREA  
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA**

**SKRIPSI**

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar  
Sarjana Farmasi**



**HILAL HAMDY ALZAEDA**

**31120041**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA  
JULI 2024**

## ABSTRAK

Sintesis, Karakterisasi Dan Uji *In Silico* 3-(4-Hexylbenzoyl)-1-[3-({[(4-Hexylphenyl)Formamido]Methanethioyl}Amino)Propyl]Thiourea Sebagai Kandidat Antikanker Payudara

Hilal Hamdi Alzaeda

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

### Abstrak

Kanker adalah penyakit yang disebabkan oleh pertumbuhan progresif dan abnormal sel-sel tubuh, yang terjadi akibat perubahan pada DNA (deoxyribonucleic acid) yang mengganggu fungsi normal sel. Oleh karena itu, diperlukan alternatif pengobatan yang efektif untuk mengatasi kanker. Penelitian ini bertujuan untuk mensintesis, mengkarakterisasi, dan mengevaluasi interaksi senyawa hasil sintesis dengan reseptor target menggunakan metode *docking*. Hasil sintesis menunjukkan perolehan *yield* sebesar 59,37%. Karakterisasi senyawa sintesis dilakukan dengan berbagai metode, menunjukkan adanya noda tunggal pada plat KLT, jarak lebur yang sempit (98°C - 100°C), dan panjang gelombang maksimum pada 261 nm. Berat molekul senyawa ini adalah 458 g/mol, dengan spektrum serapan N-H pada bilangan gelombang 3197 cm<sup>-1</sup>, C=C pada 1628 cm<sup>-1</sup>, C=O pada 1010 cm<sup>-1</sup>, C=S pada 1010 cm<sup>-1</sup>, dan C=I pada 755 cm<sup>-1</sup>. Uji *docking* mengungkapkan bahwa senyawa 3-(4-Hexylbenzoyl)-1-[3-({[(4-Hexylphenyl) Formamido] Methanethioyl} Amino) Propyl] Thiourea memiliki aktivitas terbaik terhadap protein target kanker payudara (PDB 8DV7) dengan nilai *binding affinity* sebesar -8,52 kcal/mol, lebih rendah dibandingkan senyawa pembanding (*Cyclophosphamide*). Selain itu, senyawa ini menunjukkan profil farmakokinetik yang lebih baik dibandingkan *Cyclophosphamide*. Penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa 3-(4-Hexylbenzoyl)-1-[3-({[(4-Hexylphenyl) Formamido] Methanethioyl} Amino) Propyl] Thiourea memiliki potensi besar sebagai kandidat antikanker, khususnya untuk pengobatan kanker payudara. Temuan ini membuka peluang untuk pengembangan terapi kanker yang lebih efektif dan efisien di masa depan.

**Kata kunci:** sintesis, karakterisasi, studi komputasi.

### Abstract

Cancer is a disease caused by the progressive and abnormal growth of body cells, resulting from changes in DNA (deoxyribonucleic acid) that disrupt the normal function of cells. Therefore, alternative treatments are needed to effectively combat cancer. This research aims to synthesize, characterize, and evaluate the interaction of synthesized compounds with target receptors using docking methods. The synthesis results yielded 59.37%. The characterization of the complex compounds was carried out using various methods, indicating a single spot on the TLC plate, a narrow melting range (98°C - 100°C), and a maximum wavelength of 261 nm. The molecular weight of the compound is 458 g/mol, with absorption peaks at wave numbers 3197 cm<sup>-1</sup> (N-H), 1628 cm<sup>-1</sup> (C=C), 1010 cm<sup>-1</sup> (C=O), 1010 cm<sup>-1</sup> (C=S), and 755 cm<sup>-1</sup> (C=I). Docking tests revealed that the compound 3-(4-Hexylbenzoyl)-1-[3-({[(4-Hexylphenyl) Formamido] Methanethioyl} Amino) Propyl] Thiourea exhibited the best activity against the breast cancer target protein (PDB 8DV7) with a binding affinity of -8.52 kcal/mol, lower than the reference compound (*Cyclophosphamide*). Furthermore, this compound demonstrated a better pharmacokinetic profile compared to *Cyclophosphamide*. This study indicates that 3-(4-Hexylbenzoyl)-1-[3-({[(4-Hexylphenyl) Formamido] Methanethioyl} Amino) Propyl] Thiourea has significant potential as an anticancer candidate, particularly for breast cancer treatment. These findings open opportunities for further development of more effective and efficient cancer therapies.

**Keywords:** synthesis, characterization, computational study.