

**SINTESIS DAN STUDI *IN SILICO* SENYAWA  
3-(4-HEPTYLBENZOYL)-1-[3-({(4-HEPTYLPHENYL)  
FORMAMIDO}METHANETHIOYL}AMINO)PROPYL]  
THIOUREA SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

**SKRIPSI**

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



**TAMIA FEBRIANI NURJANAH  
31120093**

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

## ABSTRAK

### SINTESIS DAN STUDI *IN SILICO* SENYAWA 3-(4-HEPTYLBENZOYL)-1-[3-((4-HEPTYLPHENYL)FORMAMIDO)METHANETHIOYL}AMINO)PROPYL]THIOUREA SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER

Tamia Febriani Nurjanah

Program Studi S-1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

#### Abstrak

Kanker merupakan penyakit yang mematikan dan menjadi penyebab kematian tertinggi di dunia setelah penyakit jantung. Tingginya kasus kanker yang terjadi serta banyaknya efek samping yang ditimbulkan dari pengobatan kemoterapi pada kanker maka diperlukan pengembangan dalam pengobatan kanker. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui apakah senyawa 3-(4-Heptylbenzoyl)-1-[3-((4-Heptylphenyl)Formamido)Methanethioyl}Amino)Propyl]Thiourea dapat disintesis dari senyawa 4-Heptilbenzoiil Klorida, KSCN, 1,3-Diaminopropana serta untuk melihat interaksinya dengan reseptor PDK1. Senyawa hasil sintesis dengan metode sonikasi dilakukan karakterisasi kemudian dilanjutkan dengan studi *in silico*, prediksi farmakokinetik dan toksisitas. Hasil sintesis didapatkan %yield sebesar 87%. Karakterisasi pada senyawa hasil sintesis ditunjukkan dengan jarak lebur 2° C (79-81° C) dan noda tunggal pada hasil KLT, panjang gelombang maksimum sebesar 241 nm, memiliki serapan -NH, C=O, dan C=S pada bilangan gelombang 3292 cm<sup>-1</sup>, 1729 cm<sup>-1</sup>, dan 1154 cm<sup>-1</sup>, serta memiliki berat molekul sebesar 597 g/mol. Hasil studi *in silico* didapatkan bahwa senyawa 3-(4-Heptylbenzoyl)-1-[3-((4-Heptylphenyl) Formamido)Methanethioyl}Amino)Propyl]Thiourea mempunyai interaksi yang baik dengan reseptor PDK1 (PDB: 5LVO) dengan nilai *binding affinity* -6,96 kcal/mol yang lebih rendah daripada obat perbandingan Capecitabine, serta memiliki profil farmakokinetik dan toksisitas yang lebih baik dibandingkan Capecitabine. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa 3-(4-Heptylbenzoyl)-1-[3-((4-Heptylphenyl)Formamido)Methanethioyl}Amino)Propyl]Thiourea berpotensi sebagai kandidat antikanker.

**Kata kunci:** Sintesis, Studi *in silico*, Tiourea

## **Abstract**

Cancer is a deadly disease and the highest cause of death in the world after heart disease. The high number of cancer cases that occur and the many side effects caused by chemotherapy treatment in cancer require development in cancer treatment. This study aims to determine whether the compound 3-(4-Heptylbenzoyl)-1-[3-({[(4-Heptylphenyl)Formamido]Methanethiyl} Amino)Propyl]Thiourea can be synthesized from 4-Heptilbenzoyl Chloride, KSCN, 1,3-Diaminopropane and to see its interaction with PDK1 receptor. Compounds synthesized by sonication method were characterized then followed by *in silico* studies, pharmacokinetic and toxicity prediction. The synthesis results obtained %yield of 87%. Characterization of the synthesized compound is shown by the melting distance of 2° C (79-81° C) and a single stain on the TLC plate, the maximum wavelength of 241 nm, has -NH, C=O, and C=S absorption at wave numbers 3292  $\text{cm}^{-1}$ , 1729  $\text{cm}^{-1}$ , and 1154  $\text{cm}^{-1}$ , and with a molecular weight of 597 g/mol. The results of *in silico* studies showed that the compound 3-(4-Heptylbenzoyl)-1-[3-({[(4-Heptylphenyl)Formamido]Methanethiyl} Amino)Propyl]Thiourea has a good interaction with the PDK1 receptor (PDB: 5LVO) with a binding affinity value of -6.96 kcal/mol which is lower than the comparator drug Capecitabine, and has a better pharmacokinetic and toxicity profile. The results of this study indicate that the compound 3-(4-Heptylbenzoyl) -1-[3-({[(4-Heptylphenyl)Formamido] Methanethiyl} Amino) Propyl] Thiourea has potential as an anticancer candidate.

**Keywords:** Synthesis, *In silico* study, Thiourea