

ABSTRAK

Latar Belakang : Kanker masih menjadi salah satu penyebab kematian utama di dunia. Penggunaan kemoterapi untuk mengatasi kanker yang berkepanjangan dapat menyebabkan resistensi, sehingga perlu dilakukan penelitian untuk mencari alternatif baru pengobatan kanker. Turunan thiourea diketahui memiliki aktivitas sitotoksik dan dapat dikembangkan sebagai agen kemoterapi. Penambahan gugus penarik elektron diketahui dapat meningkatkan aktivitas turunan thiourea, salah satunya golongan Halogen. Senyawa turunan *N-Fenil N-Fenilasetil Thiourea* dengan substituen Halogen belum pernah diteliti sebelumnya, sehingga perlu dilakukan kajian berdasarkan penambatan molekul dan hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas.

Tujuan : Mengetahui potensi senyawa turunan *N-Fenil N-Fenilasetil Thiourea* dengan substituen halogen dapat dikembangkan menjadi inhibitor VEGFR2

Metode : Penelitian ini dilakukan dengan melakukan penambatan molekul pada 17 set senyawa turunan *N-Fenil N-Fenilasetil Thiourea* dengan substituen halogen terhadap inhibitor VEGFR2, dan analisis kajian HKSA. Senyawa terbaik kemudian dikaji kembali berdasarkan sifat *druglikeness* dan toksisitasnya secara *in silico*.

Hasil : Senyawa 5 (dengan substituen gugus F pada R1, R3 dan R5) merupakan senyawa yang memiliki potensi inhibitor VEGFR2 terbaik dengan nilai penambatan molekul -102.201, terdapat hubungan struktur dan aktivitas senyawa berdasarkan persamaan HKSA dengan nilai validasi $R = 0.982$, $s = 0.003$, $F = 12,1492$, $p < 0.0064$, $Q2 = 0.632$, $SPress = 0.009$ dan $SDEP = 0.005$. Senyawa 5 telah memenuhi kriteria *druglikeness* dan dapat dikembangkan menjadi agen antikanker yang selektif secara *in silico*.

Kata kunci : Turunan thiourea, Kanker Ovarium, In Silico.