

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN UJI IN SILIKO 3-METHYL-
1-(NAPHTHALENE-2-CARBONYL)THIOUREA SEBAGAI SIRT1
INHIBITOR**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana
Farmasi pada Program Studi S1 Farmasi STIKes Bakti Tunas Husada

Muhammad Ikhlas Permana Dwiyana

31117027



**PROGRAM STUDI FARMASI
STIKes BHAKTI TUNAS HUSADA
PROGRAM STUDI S1 FARMASI
KOTA TASIKMALAYA**

2021

ABSTRACT

3-methyl-1-(naphthalene-2-carbonyl)thiourea can be synthesized through the reaction between *N-Methylthiourea* with *2-naphthoyl chloride* dissolved in tetrahydrofuran by reflux at 100°C for 7 hours. Purity test was carried out with *Hot-stage Microscopy* and *Thin Layer Chromatography*. Compound characterization using instruments *UV-Vis Spectrophotometer*, *IR Spectrophotometer* and *Mass Spectrometer*. The purpose of this study was to synthesize, characterize and interact with the synthesized compound with the target receptor using the docking method using *AutodockTools 1.5.6* software. The weight of the synthesized compound was 0,9479 g, the melting distance was 97-99°C, *Rf* Chloroform:Ethanol (9:1) 0,609, Ethyl Acetate:Methanol (9:1) 0,857, Diethyl Ether:Methanol (8:1) 0,842, the maximum wavelength was 283 nm, gave absorption of N-H at wave number 3303,54 cm^{-1} , C=Oamide 1657,37 cm^{-1} , C=S 1123,33 cm^{-1} , C=C 1560,37 cm^{-1} and C-N 1304,29 cm^{-1} . The docking result of *3-methyl-1-(naphthalene-2-carbonyl)thiourea* compound have a good enough interaction with the 415I receptor with a Gibbs free energy value (ΔG)/binding affinity of -7,75 kcal/mol and an inhibition constant (*Ic*) of 2,08 μM . The result of *Molecular Dynamic* get the lowest fluctuation at residue amino acids VAL258, ILE437 and LEU259.

Keywords: synthesized, purity test, characterization, docking, binding affinity.

ABSTRAK

Senyawa *3-methyl-1-(naphthalene-2-carbonyl)thiourea* dapat disintesis melalui reaksi antara *N-Methylthiourea* dan *2-naphthoyl chloride* yang dilarutkan dalam tetrahydrofuran dengan cara refluks pada suhu 100°C selama 7 jam. Uji kemurnian dilakukan dengan *Hot Stage Microscopy* dan Kromatografi Lapis Tipis. Karakterisasi senyawa menggunakan instrumen Spektrofotometri UV-Vis, Spektrofotometer IR dan Spektrometer Massa. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mensintesis, Karakterisasi dan interaksi senyawa hasil sintesis dengan reseptor target dengan metode docking menggunakan software *AutodockTools 1.5.6*. Bobot senyawa hasil sintesis adalah 0,9479 gram, jarak lebur sebesar 97-99°C, *Rf* Kloroform:Etanol (9:1) 0,609, Etil Asetat : Metanol (9:1) 0,857, Dietil Eter : Metanol (8:1) 0,842, panjang gelombang maksimum 283 nm, memberikan serapan N-H pada bilangan gelombang 3303,54 cm^{-1} , C=O_{amida} 1657,37 cm^{-1} , C=S 1123,33 cm^{-1} , C=C 1560,37 cm^{-1} dan C-N 1304,29 cm^{-1} . Hasil docking senyawa *3-methyl-1-(naphthalene-2-carbonyl)thiourea* memiliki interaksi yang cukup baik dengan reseptor 415I dengan nilai energi bebas Gibbs (ΔG)/binding affinity sebesar - 7,75 kcal/mol dan konstanta inhibisi (*Ki*) sebesar 2,08 μM . Simulasi *Molecular Dynamic* mendapatkan hasil fluktuasi terendah pada residu asam amino VAL258, ILE437 dan LEU259.

Kata kunci: sintesis, uji kemurnian, karakterisasi, docking, binding affinity.