

**STUDI MOLEKULER DOCKING, MOLEKULER DINAMIK
DAN STUDI FARMAKOKINETIK
KOMPLEKS LOGAM PLATINUM (II)–TIOUREA
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana



**RESTI FIZRIANI
31118087**

**PROGRAM STUDI S-1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
OKTOBER 2022**

ABSTRAK

Studi Molekuler Docking, Molekuler Dinamik Dan Studi Farmakokinetik Kompleks Logam Platinum (II)–Tiourea Sebagai Kandidat Antikanker

Resti Fizriani

Program Studi S-1 Farmasi, Universitas BTH

ABSTRAK

Peningkatan angka kejadian kanker setiap tahunnya menyebabkan kanker menjadi salah satu penyebab kematian paling banyak di dunia. Jenis kanker yang paling umum terjadi yaitu kanker payudara, kanker paru-paru dan kanker prostat. Logam platinum dan tiourea merupakan senyawa yang mempunyai efek antikanker. Untuk meningkatkan aktivitas tiourea sebagai antikanker dapat dilakukan modifikasi struktur, salah satunya dengan membuat kompleks platinum(II)-tiourea. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan senyawa kompleks platinum(II)-tiourea yang mempunyai interaksi yang lebih stabil dibandingkan dengan cisplatin sebagai agen antikanker. Metode yang digunakan ialah studi komputasi dengan molekuler docking, simulasi dinamika molekul serta prediksi farmakokinetik dan toksisitas. Berdasarkan hasil molekuler docking senyawa kompleks platinum (II)- tiourea mempunyai interaksi yang lebih stabil dengan binding energy lebih rendah dibandingkan dengan cisplatin. Dari hasil molekuler docking, molekuler dinamik dan studi farmakokinetik senyawa kompleks platinum (II)-tiourea yang dapat digunakan sebagai agen antikanker dan tidak menimbulkan toksisitas adalah senyawa Bis-(1-(3,4-dichlorobenzoyl)-3-methylthiourea) Platinum (II) sebagai agen antikanker paru-paru.

Kata kunci : kanker, molekuler dinamik, molekuler docking, senyawa kompleks platinum (II)-tiourea.

ABSTRACT

The increase in the incidence of cancer every year causes cancer to become one of the most common causes of death in the world. The most common types of cancer are breast cancer, lung cancer and prostate cancer. Platinum metal and thiourea is a compound that have anticancer effect. To increase the activity of thiourea as an anticancer, structural modifications can be carried out, one of which is by making a platinum(II)-thiourea complex. This study aims to obtain a platinum(II)-thiourea complex which has a more stable interaction than cisplatin as an anticancer agent. The methods used are computational studies with molecular docking, molecular dynamics simulations and pharmacokinetic and toxicity predictions. Based on the molecular docking results, the platinum (II)-thiourea complex has a more stable interaction with lower binding energy than cisplatin. From the results of molecular docking, molecular dynamics and pharmacokinetic studies of platinum (II)-thiourea complex compounds that can be used as anticancer agents and do not cause toxicity are Bis-(1-(3,4-dichlorobenzoyl)-3-methylthiourea) Platinum (II) compounds.) as a lung anticancer agent.

Keywords: cancer; molecular dynamics; molecular docking; platinum (II)-thiourea complex.