

**KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI KOMPLEKS
PLATINUM (II)-(4-HEPTILBENZOIL-3-METILTIOUREA)
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI



**RANI NURAENI
31118145**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
OKTOBER 2022**

**KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI KOMPLEKS
PLATINUM (II)-(4-HEPTILBENZOIL-3-METILTIOUREA)
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat guna memperoleh gelar Sarjana Farmasi
pada Program Studi S1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada**



**RANI NURAENI
31118145**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
OKTOBER 2022**

ABSTRAK

Karakterisasi Dan Studi Komputasi Kompleks Platinum (II)-(4-Heptilbenzoil-3-Metil Tiourea) Sebagai Kandidat Antikanker

Rani Nur'aeni

Program Studi S1 Farmasi, universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Permasalahan kesehatan secara global yang masih membebani ialah penyakit kanker. Kanker disebutkan sebagai salah-satu penyebab kematian nomor satu di seluruh dunia. Tiourea merupakan senyawa organik yang diketahui memiliki aktivitas sebagai antikanker, untuk meningkatkan aktivitas dari senyawa tiourea dilakukan modifikasi dengan pembentukan senyawa kompleks menggunakan logam platinum. Penelitian ini bertujuan untuk mensintesis, mengkarakterisasi serta melihat interaksi antara senyawa uji hasil sintesis dengan reseptor target menggunakan metode *docking*. Hasil sintesis berupa senyawa kompleks platinum (II)-(4-Heptilbenzoil-3-Metil Tiourea) yang terbentuk melalui reaksi antara senyawa 1-(4-Heptilbenzoil-3-Metil Tiourea) dengan logam K_2PtCl_4 , kemurnian hasil sintesis ditunjukkan dengan nilai jarak lebur sempit ($133-135^\circ C$), identifikasi senyawa meliputi panjang gelombang maksimum (260,4 nm), vibrasi serapan Pt-O ($490,76\text{ cm}^{-1}$) dan Pt-S ($418,11\text{ cm}^{-1}$), berat molekul (891,9907 g/mol) dan uji toksisitas menggunakan metode MTT (3-(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5-difenil tetrazolium bromid) dengan nilai IC_{50} senyawa kompleks terhadap sel WiDR sebesar $87,82\text{ }\mu\text{g/mL}$. Hasil penambatan senyawa kompleks terhadap reseptor EGFR dengan ID 6DUK lebih baik dari pembandingnya cisplatin dengan nilai *Binding Affinity* ($-7,40\text{ kcal/mol}$) dan Konstanta Inhibisi ($3,76\text{ }\mu\text{M}$). Hasil simulasi *molecular dinamik* selama 10 ns menunjukkan senyawa kompleks platinum (II)-(4-Heptilbenzoil-3-Metil Tiourea) memiliki interaksi yang stabil.

Kata kunci: *Docking*, kanker, Platinum, Sintesis, Tiourea

ABSTRACT

Characterization and Computational Studies of Platinum (II)-(4-Heptilbenzoyl-3-Methyl Thiourea) Complexes as Anticancer Candidates

Rani Nur'aeni

Study Program S1 of Pharmacy, Bakti Tunas Husada University Tasikmalaya

Abstract

The global health problem that is still a burden is cancer. Cancer is mentioned as one the leading causes of death worldwide. Thiourea is organic compound known to have anticancer activity, to increase the activity thiourea compounds, modifications were made by forming complex compounds using platinum metal. This study aims to synthesize, characterize and observe interaction between the synthesized test compound and the target receptor using the docking method. The result of synthesis is a platinum (II)-(4-Heptilbenzoyl-3-Methyl Thiourea) complex formed by the reaction between 1-(4-Heptilbenzoyl-3-Methyl Thiourea) and K₂PtCl₄ metal, the purity of the synthesis is indicated the melting distance value. narrow (133-135 °C), the identification of compounds includes the maximum wavelength (260.4 nm), absorption vibrations of Pt-O (490.76 cm⁻¹) and Pt-S (418.11 cm⁻¹), molecular weight (891.9907 g/mol) and toxicity test using MTT method (3-(4,5-dimethylthiazole-2-yl)-2,5-diphenyl tetrazolium bromide) with IC₅₀ value of complex compound against WiDR cells of 87.82 µg /mL. The results of binding complex compound to the EGFR receptor with ID 6DUK were better than that of cisplatin with the value of Binding Affinity (-7.40 kcal/mol) and Constanta Inhibition (3.76 µM). The results the molecular dynamic simulation for 10 ns show that the platinum (II)-(4-Heptilbenzoyl-3-Methyl Thiourea) complex has a stable interaction.

Keywords: *Docking, Cancer, Platinum, Synthesis, Thiourea*