

**KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI KOMPLEKS  
PLATINUM (II)-(1-(2-*CHLOROBENZOYL*)-3-  
*METHYLTHIOUREA*) SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

**SKRIPSI**

**Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat guna Menempuh Ujian Sarjana  
Farmasi Pada Program Studi S-1 Farmasi  
Universitas Bakti Tunas Husada**



**SHINTA DIYANTI  
NIM. 31118106**

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

## ABSTRAK

### KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI KOMPLEKS PLATINUM (II)-(1-(2-CHLOROBENZOYL)-3-METHYLTHIOUREA SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER

**Shinta Diyanti**

Program Studi S-1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Kanker adalah penyakit yang ditandai dengan sel-sel abnormal yang dapat tumbuh di luar kendali dan mempunyai kemampuan untuk menyerang dan berpindah antar sel dan jaringan di dalam tubuh. Tujuan penelitian ini mensintesis senyawa kompleks platinum (II)-(1-(2-klorobenzoil)-3-metil tiourea) dari 1-2-klorobenzoil tiourea dengan logam platinum, karakteristik, toksisitas serta farmakokinetik senyawa kompleks platinum(II)-(1-(2-klorobenzoil)-3-metil tiourea) yang memiliki hasil yang lebih baik dari Cisplatin. Metode Sintesis, uji kemurnian HSM, uji karakteristik Spektrofotometri Uv-Vis, Spektrofotometer IR, Spektro Massa, Uji toksisitas terhadap sel Hela dan sel T47D, Molecular *Docking*, Molecular Dynamic, prediksi pkCSM. Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilaksanakan bahwa senyawa kompleks platinum 1-(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea dapat disintesis dari hasil reaksi antara senyawa 1-(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea dengan logam K<sub>2</sub>ptl<sub>4</sub> dengan % yield sebesar 31,13 %. Dimana berdasarkan uji kemurnian HSM memiliki jarak lebur <2 serta berdasarkan karakterisasi dengan spektrofotometri UV-Vis, spektrofotometer FTIR dan spektroskopi Massa diperoleh hasil yang sesuai. Berdasarkan uji pkCSM didapatkan bahwa senyawa kompleks platinum 1-(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea mempunyai sifat farmakokinetik yang lebih baik dibandingkan dengan senyawa cisplatin. Dari hasil uji *in silico* serta molecular *docking* senyawa kompleks platinum 1-(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea diprediksi dapat berinteraksi dengan reseptor 5UU1 dengan hasil yang stabil serta mempunyai aktivitas yang lebih baik dari senyawa pembanding Cisplatin maupun dibandingkan senyawa 1-(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea dimana perolehan nilai  $\Delta G$  untuk senyawa kompleks sebesar -8,43kcal/mol sedangkan untuk nilai konstanta inhibisinya (K<sub>i</sub>) sebesar 0,664  $\mu$ M

**Kata kunci :** Thiourea, logam platinum, antikanker, sintesis kompleks, study *in silico*

## ABSTRACT

Cancer is a disease characterized by abnormal cells that can grow out of control and have the ability to invade and move between cells and tissues in the body. The aim of this research is to synthesize platinum (II)-(1-(2-chlorobenzoyl)-3-methylthiourea) from 1-2-chlorobenzoyl thiourea with platinum metal, characteristics, toxicity and pharmacokinetics of platinum(II)-(1-(2-chlorobenzoyl)-3-methylthiourea) compounds which have better yields than Cisplatin. Synthesis method, HSM purity test, Uv-Vis spectrophotometry characteristic test, IR Spectrophotometer, Mass Spectro, Toxicity test on Hela cells and T47D cells, Molecular Docking, Molecular Dynamic, pkCSM prediction. -(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea can be synthesized from the reaction between the compound 1-(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea and metal K<sub>2</sub>ptl<sub>4</sub> with a % yield of 31,13 %. Where based on the purity test HSM has a melting distance of <2 and based on characterization with UV-Vis spectrophotometry, FTIR spectrophotometer and Mass spectroscopy, the appropriate results are obtained. Based on the pkCSM test, it was found that the platinum complex 1-(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea had better pharmacokinetic properties than cisplatin. From the results of the in silico test and molecular docking of the platinum complex compound 1-(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea, it is predicted that it can interact with the 5UUI receptor with stable results and has better activity than the comparison compound Cisplatin and compared to the compound 1-(2-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea where the G value for complex compounds was -8.43 kcal/mol while the inhibition constant (K<sub>i</sub>) was 0.664 M

**Keyword :** Thiourea, platinum metal, anticancer, complex synthesis, study in silico