

**ELUSIDASI STRUKTUR DAN STUDI KOMPUTASI PLATINUM
(II) (1-(4-CHLOROBENZOYL)-3-METHYLTHIOUREA) SEBAGAI
KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana



FAHMI KAMIL

31118164

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

ABSTRAK
Elusidasi Struktur Dan Studi Komputasi Platinum (Ii) (1-(4-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea) Sebagai Kandidat Antikanker
Fahmi Kamil

Program Studi S-1 Farmasi, Universitas BTH Tasikmalaya

Abstrak

Kanker merupakan suatu penyakit yang dapat disebabkan oleh sel yang tidak normal pada jaringan tubuh yang tumbuh dan berkembang dengan cepat serta tak terkendali. Tujuan penelitian ini Untuk mengetahui senyawa kompleks 4-klorobenzoil dapat disintesis atau tidaknya untuk kandidat obat antikanker dari reaksi senyawa kompleks 1-(4-klorobenzoil)-3-metil tiourea) dengan ion platinum (II). Untuk mengetahui senyawa kompleks 1-(4-klorobenzoil)-3-metil tiourea) dengan ion platinum (II) mempunyai interaksi yang stabil daripada senyawa kompleks 4-klorobenzoil. Metode Sintesis, uji kemurnian HSM, uji karakteristik Spektrofotometri Uv-Vis, Spektrofotometer IR, Spektro Massa, Uji toksisitas terhadap sel Hela dan sel WIDR, Molecular Docking, Molecular Dinamic, prediksi pkCSM. Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan bahwa senyawa kompleks platinum ini dapat disintesis dari hasil reaksi antara senyawa 1-(4-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea dengan logam K_2PtCl_4 dengan % yield sebesar 73,98 %. 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-(4-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea memiliki sifat farmakokinetik yang lebih baik dibandingkan dengan senyawa cisplatin. Dari hasil uji *in silico* senyawa kompleks platinum 1-(4-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea diprediksi dapat berinteraksi dengan reseptor 4RJ3 dengan hasil memiliki aktivitas yang lebih baik dari senyawa pembanding Cisplatin dimana perolehan nilai ΔG untuk senyawa kompleks sebesar -6,90 kcal/mol sedangkan untuk nilai konstanta inhibisinya (K_i) sebesar 8,69 μM . Dari gambar RMSD bahwa untuk kompleks platinum yang ditandai dengan berwarna abu memiliki kestabilan interaksi dengan besarnya nilai rata-rata yaitu (1.559), minimum (0.90) dan maksimum (2.10).
Kata kunci: Thiourea, logam platinum, antikanker, sintesis kompleks, *study in silico*

Abstract

*Cancer is a disease that can be caused by abnormal cells in body tissues that grow and develop rapidly and uncontrollably. The purpose of this study is to find out whether the complex compound 4-chlorobenzoyl can be synthesized or not for anticancer drug candidates from the reaction of complex compounds 1-(4-chlorobenzoyl)-3-methyl thiourea) with platinum ions (II). To find out the complex compound 1-(4-chlorobenzoyl)-3-methyl thiourea) with platinum ion (II) has a stable interaction than the complex compound 4-chlorobenzoyl. Synthesis Method, HSM purity test, Uv-Vis Spectrophotometry characteristic test, IR Spectrophotometer, Mass Spectro, Toxicity test against Hela cells and WIDR cells, Molecular Docking, Molecular Dynamic, pkCSM prediction.. Based on the results of studies that have been carried out that platinum complex compounds can be synthesized from the results of the reaction between compounds 1-(4-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea with metal K_2PtCl_4 with a % yield of 73.98 %. 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 obtained appropriate results. Based on the pkCSM test, it was found that the platinum complex compound 1-(4-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea has better pharmacokinetic properties compared to cisplatin compounds. From the results of the *in silico* test, the platinum complex compound 1-(4-Chlorobenzoyl)-3-Methylthiourea is predicted to interact with the 4RJ3 receptor with the results of having better activity than the comparison compound Cisplatin where the ΔG value for complex compounds is -6.90 kcal / mol while for the value of the inhibition constant (K_i) it is as much as 8.69 μM . From the RMSD figure that for the platinum marked in gray has a stable interaction with the magnitude of the average values of (1.559), the minimum (0.90) and the maximum (2.10).*

Keywords: Thiourea, platinum metal, anticancer, complex synthesis, study in silico