

SINTESIS DAN STUDI KOMPUTASI KOMPLEKS
Bis-(1-(2-Naphthoylbenzoyl)-3-Methylthiourea) Pt(II)
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER

SKRIPSI

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



RAHMA SARI NATASYA
31118049

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

ABSTRAK

Sintesis dan Studi Komputasi Kompleks *Bis-(1-(2-Naphthoylbenzoyl)-3-Methylthiourea) Pt(II)* Sebagai Kandidat Antikanker

Rahma Sari Natasya

S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Kanker merupakan masalah kesehatan yang disebabkan oleh pertumbuhan sel yang tidak terkendali dan akan terus membelah diri. *Thiourea* merupakan senyawa yang saat ini sudah digunakan sebagai antikanker dan mampu memberikan aktivitas sitotoksik. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mensintesis, karakterisasi, uji sitotoksik dengan metode *MTT assay* dan interaksi senyawa hasil sintesis dengan reseptor target dengan metode docking menggunakan *software AutodockTools 1.5.6*. Senyawa kompleks *Bis-(1-(2-naphthoylbenzoyl)-3-methylthiourea) Pt(II)* dapat disintesis melalui reaksi antara logam K_2PtCl_4 dengan ligan *1-(2-naphthoylbenzoyl)-3-methyl thiourea* yang dilarutkan dalam asetonitril dengan cara refluks pada suhu ruang selama 48 jam. Bobot senyawa hasil sintesis adalah 232 mg. Karakterisasi senyawa kompleks meliputi jarak lebur sebesar 103-105°C, Panjang gelombang maksimum 283 nm, memberikan serapan Pt-O pada bilangan gelombang 481,8 cm^{-1} , dengan berat molekul 772,6093 g/mol. Hasil docking senyawa kompleks yang disintesis memiliki interaksi yang baik dengan reseptor 3ERT yang lebih baik dari cisplatin dengan nilai energi bebas Gibbs (ΔG)/binding affinity sebesar -13,39 kcal/mol dan konstanta inhibisi (K_i) sebesar $152,84 \times 10^{-6} \mu M$. Hasil simulasi molekular dinamik selama 10 ns menunjukkan bahwa *Bis-(1-(2-naphthoylbenzoyl)-3-methyl thiourea) Pt(II)* memiliki interaksi yang stabil.

Kata Kunci: aktivitas sitotoksik, binding afinitas, docking, molekular dinamik, sintesis

Abstract

Cancer is a health problem caused by uncontrolled cell growth and will continue to divide. Thiourea is a compound that is currently used as an anticancer and is capable of providing cytotoxic activity. The purpose of this study was to synthesize, characterize, test cytotoxicity with the MTT assay method and the interaction of the synthesized compound with the target receptor by docking method using AutodockTools 1.5.6 software. Bis-(1-(2-naphthoylbenzoyl)-3-methylthiourea) Pt(II) complex can be synthesized through the reaction between metal K_2PtCl_4 with 1-(2-naphthoylbenzoyl)-3-methyl thiourea dissolved in acetonitrile by reflux at room temperature for 48 hours. The weight of the synthesized compound was 232 mg. The characterization of complex compounds includes a melting range of 103-105°C, a maximum wavelength of 283 nm, giving Pt-O absorption at a wave number of 481.8 cm^{-1} , with a molecular weight of 772.6093 g/mol. The docking results of the synthesized complex compound have a good interaction with the 3ERT receptor which is better than cisplatin with a Gibbs free energy value (ΔG)/binding affinity of -13.39 kcal/mol and an inhibition constant (K_i) of $152.84 \times 10^{-6} \mu M$. Molecular dynamic simulation results for 10 ns show that Bis-(1-(2-naphthoylbenzoyl)-3-methyl thiourea) Pt(II) has a stable interaction.

Keywords: binding affinity, cytotoxic activity, docking, molekular dynamic, synthesis