

**STUDI KOMPUTASI DAN SINTESIS KOMPLEKS
PLATINUM (II)-(4-FLUOROBENZOIL)-3-METILTIOUREA
SEBAGAI ANTIKANKER**

SKRIPSI



**LENY NUR OCTAVIA
31118131**

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

**STUDI KOMPUTASI DAN SINTESIS KOMPLEKS
PLATINUM (II)-(4-FLUOROBENZOIL)-3-METILTIOUREA
SEBAGAI ANTIKANKER**

SKRIPSI

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



**LENY NUR OCTAVIA
31118131**

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

ABSTRAK
Studi Komputasi dan Sintesis Kompleks Platinum (II)-(4-Fluorobenzoil)-3-Metiltiourea sebagai Antikanker

Leny Nur Octavia

S1 Farmasi, Universitas BTH Tasikmalaya

Senyawa turunan tiourea dapat ditingkatkan aktivitasnya apabila dijadikan senyawa kompleks. Tujuan penelitian yaitu membandingkan senyawa Kompleks Platinum (II)-(4-Fluorobenzoil)-3-Metiltiourea pada studi komputasi dengan senyawa cisplatin dan mensintesis senyawa tersebut dari senyawa 1-(4-Fluorobenzoil)-3-metiltiourea dan K_2PtCl_4 sebagai antikanker. Metode penelitian dengan cara pengujian *in silico* dan *in vitro*. Hasil yang didapat berupa nilai Binding affinity (ΔG), Konstanta Inhibisi, RMSD, RMSF, %Recovery, Jarak lebur, Panjang gelombang, Bilangan gelombang, Berat molekul, IC50 pada sel WIDR secara berturut-turut diperoleh : -8,03 kcal/mol, 1,3 μM pada reseptor Esterogen pada kanker payudara dengan kode reseptor 3EQM (yang sudah tervalidasi dengan menghasilkan nilai RMSD 0,83Å), 0,886 Å, 0,441 Å, 101 %, 221,6-222,7 °C, λ_{max} 233.1 nm, vibarasi Pt-S 583,1 cm^{-1} dan Pt-O sebesar 486,4 cm^{-1} , berat molekul 655,3060 g/mol 682,908 $\mu g/mL$. Senyawa uji lebih baik dibanding cisplatin pada molecular docking dan stabil pada molecular dinamik dibandingkan senyawa awal, serta sudah terbentuk senyawa kompleks pada hasil sintesis tetapi pengujian *invitro* lebih baik senyawa awal dibandingkan senyawa uji.

Kata Kunci : Antikanker, Cisplatin, docking, sintesis, Platinum (II)-(4-Fluorobenzoil)-3-Metiltiourea.

Abstract

*Thiourea-derived compounds can increase their activity if they are made into complex compounds. The purpose of this research is to compare the compound Platinum (II)-(4-Fluorobenzoyl)-3-Methylthiourea in computational studies with cisplatin compounds and synthesize these compounds from compounds 1-(4-Fluorobenzoyl)-3-methylthiourea and K_2PtCl_4 as anticancer. The research method is by *in silico* and *in vitro* testing. The results obtained in the form of Binding affinity (ΔG), Inhibition Constant, RMSD, RMSF, %Recovery, Melting Distance, Wavelength, Wavenumber, Molecular Weight, IC50 values in WIDR cells respectively obtained: -8.03 kcal/mol, 1.3 M on the Estrogen receptor in breast cancer with the receptor code 3EQM (which has been validated by producing an RMSD value of 0.83), 0.886 , 0.441 , 101%, 221.6-222.7 °C, max 233.1 nm, Pt-S vibration is 583.1 cm^{-1} and Pt-O is 486.4 cm^{-1} , molecular weight is 655.3060 g/mol 682.908 g/mL. The test compound is better than cisplatin in molecular docking and stable in molecular dynamics compared to the initial compound, and complex compounds have been formed in the synthesis results, but *in vitro* testing is better than the compound compared to the test compound.*

Keywords: Anti cancer, Cisplatin, docking, synthesis, Platinum (II)-(4-Fluorobenzoyl)-3-Methyl Thiourea