

**STUDI *IN SILICO*, SINTESIS, DAN *RADIOLABELING*
¹³¹I-(4-FLUOROBENZOIL-3-METILTIOUREA) SEBAGAI KANDIDAT
RADIOFARMAKA TERANOSTIK KANKER PAYUDARA**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana



FEBBY PRATAMA

NIM 31119158

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

2023

ABSTRAK

Studi *In Silico*, Sintesis dan Radiolabeling ^{131}I -(4-fluorobenzoil-3-metiltiourea) Sebagai Kandidat Radiofarmaka Teranostik Kanker Payudara

Febby Pratama

Program Studi S-1 Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas BTH Tasikmalaya

Abstrak

1-(4-Fluorobenzoil-3-metiltiourea) merupakan senyawa turunan tiourea. Senyawa turunan tiourea banyak dikembangkan sebagai kandidat antikanker. 1-(4-Fluorobenzoil-3-metiltiourea) merupakan ligan yang berpotensi untuk tujuan teranostik dalam bentuk kompleks dengan radionuklida seperti Iodium-131. Penelitian ini bertujuan untuk melihat potensi ^{131}I -(4-Fluorobenzoil-3-metiltiourea) menggunakan studi *In Silico* untuk melihat energi ikatan dan kestabilan dari senyawa terhadap reseptor kanker payudara yaitu estrogen HER2, NUDT5 dan melakukan sintesis serta pelabelan senyawa 1-(4-Fluorobenzoil-3-metiltiourea) oleh Iodium-131. Dari hasil *molecular docking*, ^{131}I -(4-Fluorobenzoil-3-metiltiourea) mempunyai aktivitas terbaiknya pada reseptor HER2 (PDB ID 3PP0) dengan *binding affinity* (ΔG) -6.13 dan nilai *Ki* (μM) 32,05. Pada hasil *molecular dynamics* juga, ^{131}I -(4-Fluorobenzoil-3-metiltiourea) ini memiliki kestabilan yang baik mulai dari rentang 50ns. Senyawa 1-(4-Fluorobenzoil-3-metiltiourea) ini telah berhasil disintesis dan dilabel dengan iodium-131 menggunakan metode radioiodinasi secara tidak langsung.

Kata Kunci: Iodium-131, Tiourea, Histamin, *Radiolabeling*, *In Silico*

Abstract

1-(4-Fluorobenzoyl-3-methylthiourea) is a thiourea-derived compound. Thiourea-derived compounds are widely developed as anticancer candidates. 1-(4-Fluorobenzoyl-3-methylthiourea) is a potential ligand for teranostic purposes in the form of complexes with radionuclides such as Iodine-131. This study aims to see the potential of ^{131}I -(4-Fluorobenzoyl-3-methylthiourea) using *In Silico* studies to see the binding energy and stability of the compound against breast cancer receptors namely HER2 estrogen, NUDT5 and synthesizing and labeling 1-(4-Fluorobenzoyl-3-methylthiourea) compounds with Iodine-131. From the molecular docking results, ^{131}I -(4-Fluorobenzoyl-3-methylthiourea) has the best activity on HER2 receptor (PDB ID 3PP0) with binding affinity (ΔG) -6.13 and *Ki* value (μM) 32.05. In the molecular dynamics results, the ^{131}I -(4-Fluorobenzoyl-3-methylthiourea) has good stability starting from the 50ns range. This 1-(4-Fluorobenzoyl-3-methylthiourea) compound has been successfully synthesized and labeled with iodine-131 using indirect radioiodination method.

Keywords: *Iodine-131*, *Thiourea*, *Histamine*, *Radiolabeling*, *In Silico*