

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN UJI *IN SILICO* SENYAWA
KOMPLEKS *BIS-(1-(4-FLUOROBENZOYL)-3-
PHENYLTHIOUREA)-PLATINUM (II)* SEBAGAI KANDIDAT
ANTIKANKER**

SKRIPSI



**TIRA FRATIWI
31119193**

**PROGRAM STUDI S1-FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
2023**

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN UJI *IN SILICO* SENYAWA
KOMPLEKS *BIS-(1-(4-FLUOROBENZOYL)-3-
PHENYLTHIOUREA)-PLATINUM (II)* SEBAGAI KANDIDAT
ANTIKANKER**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana
Farmasi**



**TIRA FRATIWI
31119193**

**PROGRAM STUDI S1-FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
2023**

ABSTRAK

Sintesis, Karakterisasi dan Uji *In Silico* Senyawa Kompleks *Bis-(1-(4-Fluorobenzoyl)-3-phenylthiourea)-Platinum(II)* Sebagai Kandidat Antikanker

Tira Fratiwi

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

ABSTRAK

Kanker merupakan suatu penyakit akibat sel normal yang tumbuh dan berkembang secara cepat dan tidak terkendali. Senyawa kompleks berbasis platinum memiliki aktivitas antikanker, seperti carboplatin. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui Senyawa *bis-(1-(4-Fluorobenzoyl)-3-phenylthiourea)-Platinum(II)* memiliki aktivitas antikanker secara *in silico*, dan melakukan sintesis serta karakterisasi senyawa *bis-(1-(4-Fluorobenzoyl)-3-Phenylthiourea)-Platinum(II)*, dari ligan *1-(4-Fluorobenzoyl)-3-Phenylthiourea* dan K_2PtCl_4 . Metode sintesis yang digunakan yaitu refluks dengan hasil %yield sebesar 48,62 %. Uji kemurnian menggunakan KLT dan HSM. Karakterisasi menggunakan metode spektrofotometri UV-Vis hasil panjang gelombang 273 nm, FTIR dengan bilangan gelombang 597 dan 497 untuk gugus fungsi Pt-O dan Pt-S, serta Spektroskopi Massa melihat Berat molekul. Untuk uji aktivitas secara *in silico* senyawa *Bis-(1-(4-Fluorobenzoyl)-3-phenylthiourea)-Platinum(II)* menghasilkan nilai *binding affinity* terbaik yaitu -9,44 kcal/mol dan nilai KI sebesar 119.98 nM pada reseptor EGFR (kode PDB 4I22). Hasil *molecular dynamic* senyawa kompleks dengan nilai RMSD dan RMSF menghasilkan grafik yang mirip dengan Carboplatin. Pada prediksi farmakokinetik senyawa kompleks memiliki absorpsi, distribusi dan metabolisme yang baik, serta tidak menimbulkan karsinogen.

Kata kunci: senyawa kompleks; sintesis, uji *in silico*, antikanker

Abstract

*Cancer is a disease caused by normal cells that grow and expand in an uncontrolled and fast manner. Cancer can be treated with chemotherapy and anticancer medicines. Carboplatin and other platinum-based complex chemicals have anticancer properties. This work seeks to evaluate the compound *bis-(1-(4-Fluorobenzoyl) -3-phenylthiourea)-Platinum (II)* possesses anticancer activity in silico, and to synthesizes and describe *bis-(1-(4-Fluorobenzoyl)-3-Phenylthiourea)-Platinum(II)* compound, from *1-(4-Fluorobenzoyl)-3-Phenylthiourea* and K_2PtCl_4 . With a yield of 48.62%, the synthesis technique employed was reflux. KLT and HSM purity tests were performed. Characterization of complicated compounds created employing instrument approaches, including UV-Vis spectrophotometry at a wavelength of 273 nm, FTIR absorption at wavenumbers 597 and 497 for Pt-O and Pt-S functional groups, and mass spectroscopy at molecular weight. *Bis-(1-(4-Fluorobenzoyl)-3-phenylthiourea)-Platinum (II)* molecule generated the greatest binding affinity value of -9.44 kcal/mol and KI value of 119.98 nM at the EGFR receptor (PDB code 4I22) in silico activity assays. Carboplatin-like graphs are produced by molecular dynamic results of complicated compounds with RMSD and RMSF values. The complex chemical has good absorption, distribution, and metabolism according to pharmacokinetic predictions, and it does not create carcinogens.*

Keywords: complex compound; synthesis, *in silico* test, anticancer

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :

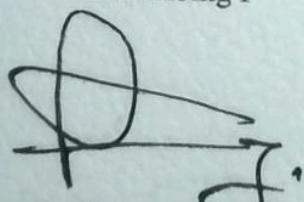
Nama : Tira Fratiwi
NIM : 31119193
Program Studi : S1 Farmasi
Fakultas : Farmasi
Judul : Sintesis, Karakterisasi dan Uji *In Silico* Senyawa Kompleks *Bis-(1-(4-Fluorobenzoyl)-3-phenylthiourea)-Platinum(II)* Sebagai Kandidat Antikanker

Telah disetujui oleh Pembimbing I dan Pembimbing II serta telah diajukan pada Sidang Sarjana sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

Ditetapkan di : Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

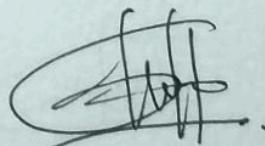
Tanggal : 11 Agustus - 2023

Pembimbing I



Dr. Ruswanto, M.Si

Pembimbing II



Anindita Tri Kusuma P, M.Si