

**STUDI *IN SILICO* DAN OPTIMASI *RADIOLABELING* SENYAWA 1-(3-
{(NAFTALEN-2-YLFORMAMIDO) METHANETHIOYL]
AMINO}PROPIL)-3-(NAFTALENA-2-KARBONIL) TIOUREA
SEBAGAI KANDIDAT RADIODIAGNOSTIK
TERAPI KANKER PAYUDARA**

SKRIPSI

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



MIQDAD NURABDULLAH AL ANSHARI

31120125

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2024**

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* DAN OPTIMASI *RADIOLABELING* SENYAWA 1-(3- {[(NAFTALEN-2-YLFORMAMIDO) METHANETHIOYL] AMINO}PROPIL)-3- (NAFTALENA-2-KARBONIL) TIOUREA SEBAGAI KANDIDAT RADIODIAGNOSTIK TERAPI KANKER PAYUDARA

Miqdad Nurabdullah Al Anshari

Program Studi S-1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Kanker payudara merupakan salah satu jenis kanker paling umum di dunia, dan deteksi dini melalui metode diagnostik yang akurat adalah kunci untuk meningkatkan prognosis pasien. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa 1-(3-{[(naftalena-2-ilformamido)methanethioyl]amino}propil)-3-(naftalena-2-karbonil)tiourea sebagai agen radiodiagnostik untuk kanker payudara melalui studi *in silico*, dan *radiolabeling* dengan Teknesium-99m. Hasilnya menunjukkan bahwa senyawa radiodiagnostik ^{99m}Tc -NT memiliki *binding affinity* dan K_i yang lebih baik daripada senyawa radiodiagnostik ^{18}F floroestradiol yaitu -12.01 kcal/mol dan 0.00156 μM serta memiliki kestabilan yang baik mulai rentang 35 ns pada simulasi *molecular dynamic*, serta memiliki profil farmakokinetik dan toksisitas yang baik. Senyawa radiodiagnostik ^{99m}Tc -NT berhasil disintesis dengan metode langsung dan memiliki kemurnian radiokimia >90%.

Kata Kunci: pencitraan nuklir, radioisotop, studi komputasi, tiourea, teknesium-99m

Abstract

Breast cancer is one of the most common types of cancer in the world, and early detection through accurate diagnostic methods is key to improving patient prognosis. This study aims to evaluate the potential of 1-(3-{[(naphthalene-2-ylformamido)methanethioyl]amino}propyl)-3-(naphthalene-2-carbonyl)thiourea compound as a radiodiagnostic agent for breast cancer through in silico studies and radiolabeling with Technetium-99m. The results show that the radiodiagnostic compound ^{99m}Tc -NT has better binding affinity and K_i than the radiodiagnostic compound ^{18}F floroestradiol which is -12.01 kcal/mol and 0.00156 μM and has good stability starting from the range of 35 ns in molecular dynamic simulations, and has a good pharmacokinetic and toxicity profile. The radiodiagnostic compound ^{99m}Tc -NT was successfully synthesized by direct method and has a radiochemical purity of >90%.

Keywords: nuclear imaging, radioisotope, computational study, thiourea, technetium-99m