

**STUDI KOMPUTASI DAN SINTESIS SENYAWA 1-(5-
{(NAPHTHALEN-2-YLFORMAMIDO)METHANETHIOYL]
AMINO}PENTYL)-3-(NAPHTHALENE-2-CARBONYL)
THIOUREA SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

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



**MEISYE UTAMI DIANINGSIH
31120081**

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

ABSTRAK

Studi Komputasi dan Sintesis Senyawa 1-(5- $\{[(Naphthalen-2-ylformamido) Methanethioyl] Amino\}$ Pentyl)-3-(Naphthalene-2-Carbonyl) Thiourea Sebagai Kandidat Antikanker

Meisye Utami Dianingsih

Program Studi S-1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Kanker merupakan penyakit tidak menular yang ditandai dengan pertumbuhan dan penyebaran sel-sel tidak normal yang cepat berkembang dan apabila penyebarannya tidak terkontrol dapat mengakibatkan kematian. Dalam pengobatan kanker dengan cara kemoterapi, efek toksisitas senyawa obat kanker menjadi masalah. Oleh karena itu, mencari metode pengobatan alternatif untuk kanker harus dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui apakah senyawa 1-(5- $\{[(Naphthalen-2-ylformamido) Methanethioyl] Amino\}$ Pentyl)-3-(Naphthalene-2-Carbonyl) Thiourea bisa disintesis dari 2-naphthoyl chloride, KSCN dan 1,5-Diaminopentana menggunakan metode sonikasi serta untuk mengetahui interaksinya dengan reseptor 3-phosphoinositide dependent protein kinase-1 (PDK1). Senyawa hasil sintesis dengan metode sonikasi dilakukan karakterisasi dan dilanjutkan dengan studi komputasi serta prediksi farmakokinetik dan toksisitas. Hasil sintesis memperoleh % recovery sebesar 94,8%. Karakterisasi senyawa ditandai dengan adanya noda tunggal pada plat KLT dan jarak lebur yang kecil 2 °C (66-68 °C), panjang gelombang maksimum 236,2 nm, berat molekul sebesar 530,69 g/mol, memberikan serapan C=S, NH dan C=O pada daerah gelombang 1099 cm⁻¹, 3269 cm⁻¹ dan 1752 cm⁻¹. Hasil studi komputasi menunjukkan bahwa senyawa hasil sintesis 1-(5- $\{[(Naphthalen-2-ylformamido) Methanethioyl] Amino\}$ Pentyl)-3-(Naphthalene-2-Carbonyl) Thiourea memiliki aktivitas yang baik pada protein target PDK1 (PDB 2BIY dan PDB 3HRF) dengan perolehan nilai binding affinity sebesar -8,53 kcal/mol dan -10,17 kcal/mol yang menunjukkan lebih rendah dibanding senyawa pembanding (Doxorubicin) serta memiliki profil farmakokinetik yang lebih baik dibandingkan Doxorubicin. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa hasil sintesis 1-(5- $\{[(Naphthalen-2-ylformamido) Methanethioyl] Amino\}$ Pentyl)-3-(Naphthalene-2-Carbonyl) Thiourea memiliki potensi sebagai kandidat antikanker.

Kata kunci: sintesis, studi komputasi, tiourea.

Abstract

Cancer is a non-communicable disease characterised by the rapid growth and spread of abnormal cells that, if uncontrolled, can lead to death. In the treatment of cancer by means of chemotherapy, the toxicity effect of cancer drug compounds becomes a problem. Therefore, finding alternative treatment methods for cancer must be done. This study aims to determine whether the compound 1-(5-[(Naphthalen-2-ylformamido)Methanethiyl] Amino} Pentyl)-3-(Naphthalene-2-Carbonyl)Thiourea can be synthesised from 2-naphthoyl chloride, KSCN and 1,5-Diaminopentane using sonication method and to determine its interaction with 3-phosphoinositide dependent protein kinase-1 (PDK1) receptor. Compounds synthesised by sonication were characterised, followed by computational studies and pharmacokinetic and toxicity predictions. The synthesis results obtained a % recovery of 94.8%. Characterisation of the compound was characterised by the presence of a single stain on the KLT plate and a small melting distance of 2°C (66-68°C), a maximum wavelength of 236.2 nm, a molecular weight of 530.69 g/mol, giving C=S, NH and C=O absorption at 1099 cm⁻¹, 3269 cm⁻¹ and 1752 cm⁻¹ wavebands. The results of computational studies showed that the synthesised compound 1-(5-[(Naphthalen-2-ylformamido)Methanethiyl]Amino}Pentyl)-3-(Naphthalene-2-Carbonyl)Thiourea has good activity on PDK1 target proteins (PDB 2BIY and PDB 3HRF) with binding affinity values of -8, 53 kcal/mol and -10.17 kcal/mol which is lower than the comparator protein (Doxorubicin) and has a better pharmacokinetic profile than Doxorubicin. The results of this study indicate that the synthesised compound 1-(5-[(Naphthalen-2-Ylformamido)Methanethiyl]Amino}Pentyl)-3-(Naphthalene-2-Carbonyl)Thiourea has potential as an anticancer candidate.

Keywords: *synthesis, computational study, thiourea.*