

**STUDI *IN SILICO* DAN RADIOLABELING 1-(4-
HEPTYLBENZOYL-3-METHYLTHIOUREA) DENGAN
TEKNESIUM-99M SEBAGAI KANDIDAT RADIOFARMAKA
DIAGNOSTIK KANKER PAYUDARA**

SKRIPSI



MUHAMMAD FAUZAN FALAHUDDIN

31120027

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

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* DAN RADIOLABELING 1-(4-HEPTYLBENZOYL-3-METHYLTHIOUREA) DENGAN TEKNESIUM-99M SEBAGAI KANDIDAT RADIOFARMAKA DIAGNOSTIK KANKER PAYUDARA

Muhammad Fauzan Falahuddin

Program Studi S1 Farmasi, Universitas BTH Tasikmalaya

Abstrak

Senyawa 1-(4-heptilbenzoil-3-metiltiourea) merupakan turunan tiourea hasil reaksi asilasi antara N-metiltiourea dengan 4-heptilbenzoil klorida. Pembentukan kompleks antara tiourea dengan logam terbukti meningkatkan aktivitas sitotoksik dan selektivitas senyawa. Tujuan penelitian ini untuk melihat potensi senyawa ^{99m}Tc -HBM sebagai kandidat radiofarmaka kanker payudara dengan beberapa pengujian yakni *molecular docking*, *dynamics*, prediksi farmakokinetik, serta pelabelan senyawa dengan teknesium-99m. Hasil *molecular docking*, senyawa ^{99m}Tc -HBM memiliki nilai *binding affinity* yang paling baik pada reseptor HER2 (PDB ID 3PP0) yaitu -8,92 kkal/mol dengan nilai konstanta inhibisi 34,71 μM . Hasil *molecular dynamics* juga menunjukkan ^{99m}Tc -HBM memiliki kestabilan yang baik. Senyawa 1-(4-heptilbenzoil-3-metiltiourea) berhasil dilabeli dengan teknesium-99m dengan kemurnian > 95%.

Kata Kunci: Tiourea, Teknesium-99m, Radiolabeling, In Silico, Kanker payudara

Abstract

The compound 1-(4-heptylbenzoyl-3-methylthiourea) is a thiourea derivative resulting from the acylation reaction between N-methylthiourea and 4-heptylbenzoyl chloride. The formation of a complex between thiourea and metal was proven to increase the cytotoxic activity and selectivity of the compound. The aim of this research is to see the potential of the ^{99m}Tc -HBM compound as a breast cancer radiopharmaceutical candidate using several tests, namely molecular docking, dynamics, pharmacokinetic prediction, and labeling the compound with technetium-99m. Molecular docking results show that the ^{99m}Tc -HBM compound has the best binding affinity value for the HER2 receptor (PDB ID 3PP0), namely -8.92 kcal/mol with an inhibition constant value of 34.71 μM . The molecular dynamics results also show that ^{99m}Tc -HBM has good stability. The compound 1-(4-heptylbenzoyl-3-methylthiourea) was successfully labeled with technetium-99m with a purity of > 95%.

Key word: Thiourea, Technetium-99m, Radiolabeling, In Silico, Breast cancer