

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI
SENYAWA 1-(3-{{[NAPHTALEN-2-
YLFORMAMIDO)METHANETHIOYL] AMINO}PROPYL)-3-
(NAPHTHALENE-2-CARBONYL)THIOUREA
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

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



UNIVERSITAS BTH

**FITRI NUR AFIFAH
31120106**

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

ABSTRAK

Sintesis, Karakterisasi Dan Studi Komputasi Senyawa *1-(3-{{Naphthalen-2-ylformamido}Methanethioyl}Amino}Propyl)-3-(Naphthalene-2-Carbonyl)Thiourea* Sebagai Kandidat Antikanker

Fitri Nur Afifah

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Prevalensi kanker di Indonesia kian mengalami peningkatan setiap tahunnya. Tiourea berpotensi sebagai antikanker karena kemampuannya menekan pertumbuhan berbagai sel kanker. Tujuan penelitian ini yaitu mensintesis senyawa *1-(3-{{naphthalen-2-ylformamido}methanethioyl}amino}propyl)-3(naphthalene-2-carbonyl)thiourea* dari 2-naftoyl klorida, KSCN, dan 1,3-Diaminopropana dan melihat interaksinya dengan reseptor PDK1. Metode yang digunakan yaitu sintesis dengan sonikasi, karakterisasi, studi komputasi, prediksi farmakokinetik, dan toksisitas. Hasil rendemen yang diperoleh yaitu 92,6%. Hasil uji kemurnian menunjukkan satu noda pada plat KLT dan jarak lebur 67-69 °C. Hasil karakterisasi : λ max 229 nm, bobot molekul 503 g/mol, serta serapan C=S, C=O dan -NH pada 1127 cm^{-1} , 1708 cm^{-1} dan 3451 cm^{-1} . Senyawa hasil sintesis dinyatakan memiliki interaksi yang baik terhadap reseptor PDK1 (PDB 3QC4 dan 3RCJ) dengan *binding affinity* yang lebih kecil daripada senyawa pembanding (Capecitabine) serta mempunyai profil farmakokinetik yang lebih baik daripada Capecitabine. Dari penelitian ini dapat disimpulkan bahwa senyawa hasil sintesis memiliki kemampuan untuk berfungsi sebagai antikanker yang potensial.

Kata kunci: sintesis, studi komputasi, tiourea

Abstract

The prevalence of cancer in Indonesia is increasing every year. Thiourea has potential as an anticancer because of its ability to suppress the growth of various cancer cells. The aim of this research is to synthesize the compound 1-(3-{{naphthalen-2-ylformamido}methanethioyl}amino}propyl)-3(naphthalene-2-carbonyl)thiourea from 2-naphthoyl chloride, KSCN, and 1,3-Diaminopropane and looking at its interaction with the PDK1 receptor. The methods used are synthesis with sonication, characterization, computational studies, pharmacokinetic predictions and toxicity. The yield obtained was 92.6%. The purity test results showed one spot on the TLC plate and a melting distance of 67-69 °C. Characterization results: λ max 229 nm, molecular weight 503 g/mol, and absorption of C=S, C=O and -NH at 1127 cm^{-1} , 1708 cm^{-1} and 3451 cm^{-1} . The synthesized compound is stated to have good interactions with the PDK1 receptor (PDB 3QC4 and 3RCJ) with a binding affinity that is smaller than the comparison compound (Capecitabine) and has a better pharmacokinetic profile than Capecitabine. From this research it can be concluded that the synthesized compound has the ability to function as a potential anticancer.

Key words: synthesis, computational studies, thiourea