

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI *IN SILICO* SENYAWA
1-(2-NAPTHOYL)-3-(1-BENZYLPIPERIDIN-4-YL)THIOUREA
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

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



**AULIA OKTAVIANI
31121076**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2025**

ABSTRAK

SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI *IN SILICO* SENYAWA *1-(2-NAPTHOYL)-3-(1-BENZYLPIPERIDIN-4-YL)THIOUREA* SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER

Aulia Oktavianti

Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Kanker merupakan penyakit yang ditandai dengan pertumbuhan sel yang tidak terkendali dan menjadi salah satu penyebab utama kematian di dunia. Pengembangan agen antikanker yang efektif dan selektif menjadi kebutuhan penting dalam terapi kanker. Penelitian ini bertujuan mensintesis senyawa *1-(2-naphthoyl)-3-(1-benzylpiperidin-4-yl)thiourea* sebagai kandidat antikanker dan mengevaluasi interaksi serta stabilitasnya terhadap reseptor VEGFR-2 (PDB: 4ASE dan 3VNT) menggunakan pendekatan *in silico*. Sintesis dilakukan dengan metode sonikasi, diikuti karakterisasi fisik dan spektroskopi untuk memastikan kemurnian dan struktur senyawa. Selanjutnya, dilakukan simulasi *docking* untuk menilai afinitas pengikatan ligan terhadap reseptor VEGFR-2 dan simulasi dinamika molekuler untuk mengevaluasi kestabilan kompleks protein-ligan. Profil farmakokinetik dan toksisitas senyawa dianalisis melalui prediksi ADMET (Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, dan Toksisitas) secara komprehensif. Hasil *docking* menunjukkan senyawa memiliki binding affinity yang baik dengan reseptor VEGFR-2, lebih unggul dibanding capecitabine. Analisis ADMET mengindikasikan bahwa senyawa memiliki profil absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi dan toksisitas yang menjanjikan dengan risiko toksisitas yang dapat dikendalikan. Keseluruhan hasil menunjukkan potensi senyawa ini sebagai kandidat terapi antikanker untuk pengembangan lebih lanjut.

Kata kunci: *Antikanker, 2-naphthoyl chloride, sintesis senyawa, in silico, admet.*

ABSTRACT

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, AND IN-SILICO STUDIES OF THE COMPOUND 1(2-NAPTHOYL)-3-(1-BENZYLPIPERIDIN-4- YL)THIOUREA AS AN ANTICANCER CANDIDATE

Aulia Oktavianti

*Bachelor of Pharmacy Study Program, Faculty of Pharmacy, Bakti Tunas Husada University,
Tasikmalaya*

Abstract

Indonesia has various types of plants those have potential as medicine to overcome health problems in line with Cancer is a disease characterized by uncontrolled cell growth and is one of the leading causes of death worldwide. The development of effective and selective anticancer agents is a crucial need in cancer therapy. This study aims to synthesize the compound 1-(2-naphthoyl)-3-(1-benzylpiperidin-4-yl)thiourea as an anticancer candidate and evaluate its interaction and stability with the VEGFR-2 receptor (PDB: 4ASE and 3VNT) using an in silico approach. Synthesis was carried out using the sonication method, followed by physical and spectroscopic characterization to ensure the purity and structure of the compound. Next, docking simulations were performed to assess the binding affinity of the ligand to the VEGFR-2 receptor and molecular dynamics simulations to evaluate the stability of the protein-ligand complex. The pharmacokinetic and toxicity profiles of the compound were analyzed through comprehensive ADMET (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity) predictions. The docking results showed that the compound has good binding affinity with the VEGFR-2 receptor, superior to capecitabine. ADMET analysis indicated that the compound has a promising absorption, distribution, metabolism, and toxicity profile with a manageable toxicity risk. Overall, the results demonstrate the compound's potential as an anticancer therapeutic candidate for further development.

Keywords: *Anticancer, 2-naphthoyl chloride, compound synthesis, in silico, admet*