

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI
SENYAWA *1-(2-NAPHTHOYL)-3-(ANTHRACEN-2-
YL)THIOUREA* SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER**

SKRIPSI

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



UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA

RATIH SUCI NUR FAZRIANI

31121021

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

ABSTRAK

SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI SENYAWA 1-(2-NAPHTHOYL)-3-(ANTHRACEN-2- YL)THIOUREA SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER

Ratih Suci Nur Fazriani

Program Studi S1 Farmasi, Universitas BTH 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. Thiourea merupakan senyawa penuntun yang memiliki peranan penting dalam pengembangan obat antikanker. 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 bahwa senyawa 1-(2-naphthoyl)-3-(anthracen-2-yl)thiourea dapat disintesis dari reaksi 2-naphthoyl chloride, KSCN dan 2-aminoanthracene menggunakan metode sonikasi serta untuk mengetahui interaksinya dengan reseptor *Limfoma sel B 2* (BCI-2). Senyawa hasil sintesis dengan metode sonikasi dilakukan uji kemurnian, karakterisasi dan identifikasi, studi komputasi, *molecular dynamic* serta prediksi profil farmakokinetik dan toksisitas. Hasil sintesis memperoleh % recovery sebesar 87,75 %. Uji kemurnian memiliki titik lebur 458-460° C dan senyawa ditandai dengan adanya noda tunggal. Hasil karakterisasi bahwa senyawa memiliki panjang gelombang maksimum 271,5 nm, berat molekul sebesar 406,51 g/mol, memberikan serapan C=S, C=O dan -NH pada daerah gelombang 1129 cm⁻¹, 1706 cm⁻¹ dan 3256 cm⁻¹. Hasil studi komputasi menunjukkan bahwa senyawa hasil sintesis 1-(2-naphthoyl)-3-(anthracen-2-yl)thiourea memiliki aktivitas yang baik pada protein target BCI-2 (PDB 6QGG dan PDB 6QGJ) dengan perolehan nilai *binding affinity* sebesar -9,28 kcal/mol dan -9,63 kcal/mol yang menunjukkan lebih rendah dibandingkan dengan senyawa pembanding (Doxorubicin) serta memiliki profil farmakokinetik yang lebih baik dibandingkan dengan Doxorubicin. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa hasil sintesis 1-(2-naphthoyl)-3-(anthracen-2-yl)thiourea memiliki potensi sebagai kandidat antikanker.

Kata kunci: Kanker, thiourea, sintesis, studi komputasi, toksisitas.

Abstract

Cancer is a non-communicable disease characterized by the rapid growth and spread of abnormal cells and if the spread is not controlled can cause death. Thiourea is a guide compound that has an important role in the development of anticancer drugs. In cancer treatment by chemotherapy, the toxic effects of cancer drug compounds become a problem. Therefore, finding alternative treatment methods for cancer must be done. This study aims to determine that the compound 1-(2-naphthoyl)-3-(anthracen-2-yl)thiourea can be synthesized from the reaction of 2-naphthoyl chloride, KSCN and 2-aminoanthracene using the sonication method and to determine its interaction with the B-cell Lymphoma receptor 2 (BCI-2). The compound synthesized by the sonication method was subjected to purity tests, characterization and identification, computational studies, molecular dynamics as well as prediction of pharmacokinetic and toxicity profiles. The synthesis results obtained a % recovery of 87,75%. The purity test has a melting point of 458-460° C and the compound is characterized by the presence of a single spot. The characterization results show that the compound has a maximum wavelenght of 271,5 nm, a molecular weight of 406,51 g/mol, providing C=S, C=O and -NH absorption in the wave region of 1129 cm⁻¹, 1706 cm⁻¹ and 3256 cm⁻¹. The results of computational studies indicate that the synthesized compound 1-(2-naphthoyl)-3-(anthracen-2-yl)thiourea has good activity on the target protein BCI-2 (PDB 6QGG and PDB 6QGJ) with binding affinity values of -9,28 kcal/mol and -9,63 kcal/mol which are lower than the reference compound (Doxorubicin) and has a better pharmacokinetic profile compared to Doxorubicin. The results of

this study indicate that the synthesized compound 1-(2-naphthoyl)-3-(anthracen-2-yl)thiourea has potential as an anticancer candidate.

Keywords: *Cancer, thiourea, synthesis, computational studies, toxicity.*