

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI
SENYAWA 5-FLUORO-N1,N2-BIS(4-METHYLBENZOYL)-2,4-
DIOXOPYRIMIDINE-1,3(2H,4H)-BIS(CARBOTHIOAMIDE)
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA**

SKRIPSI

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



CYNDI ARWINI GUNAWAN

31121045

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA TASIKMALAYA
Juli 2025**

**SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI
SENYAWA 5-FLUORO-N1,N2-BIS(4-METHYLBENZOYL)-2,4-
DIOXOPYRIMIDINE-1,3(2H,4H)-BIS(CARBOTHIOAMIDE)
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA**

SKRIPSI

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



CYNDI ARWINI GUNAWAN

31121045

PROGRAM STUDI S1 FARMASI

FAKULTAS FARMASI

UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA TASIKMALAYA

Juli 2025

ABSTRAK

SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI SENYAWA 5-FLUORO-N1,N2-BIS(4-METHYLBENZOYL)-2,4-DIOXOPYRIMIDINE-1,3(2H,4H)-BIS(CARBOTHIOAMIDE) SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA

Cyndi Arwini Gunawan

Program Studi S1 Farmasi Fakultas Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Kanker payudara merupakan salah satu penyebab utama kematian akibat kanker di Indonesia. Penelitian ini memiliki tujuan untuk mensintesis senyawa turunan 5-FU, yaitu 5-Fluoro-N1,N2-bis(4-methylbenzoyl)-2,4-dioxypyrimidine-1,3(2H,4H)-bis(carbothioamide). Metode: sonikasi, karakterisasi, prediksi farmakokinetik, toksisitas dan studi komputasi. Proses sintesis dilakukan menggunakan reaksi antara 5-fluorourasil, KSCN, dan 4-methylbenzoyl dalam pelarut asetonitril. Hasil: hasil sintesis pada uji kemurnian titik lebur 5-Fluoro-N1,N2-Bis(4-Methylbenzoyl) 2,4-Dioxypyrimidine-1,3(2H,4H)-Bis(Carbothioamide) adalah 380-390°C, 5-Fluorourasil 278-280°C dan KSCN 216-218°C serta menghasilkan 1 noda pada plat KLT spektrum UV-Vis menunjukkan pergeseran hipsokromik dengan λ_{maks} 268 nm, serapan C-Cl, C-N dan -NH dengan bilangan gelombang 745,5 cm^{-1} , 1244 cm^{-1} dan 3344 cm^{-1} . Studi in silico dilakukan melalui metode molecular docking dan molecular dynamics terhadap reseptor thymidylate synthase (PDB: 6QXG dan 6QGG), menyatakan bahwa senyawa hasil sintesis mempunyai afinitas pengikatan lebih baik dibandingkan ligan pembanding (5-FU). Prediksi ADMET menggunakan pkCSM menunjukkan profil farmakokinetik dan toksisitas yang baik. Kesimpulan: senyawa ini berpotensi sebagai kandidat antikanker payudara yang lebih efektif dibandingkan 5-FU.

Kata kunci: Kanker Payudara, Studi Komputasi, Sintesis

SINTESIS, KARAKTERISASI DAN STUDI KOMPUTASI SENYAWA 5-
FLUORO-N1,N2-BIS(4-METHYLBENZOYL)-2,4-DIOXOPYRIMIDINE-
1,3(2H,4H)-BIS(CARBOTHIOAMIDE) SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER
PAYUDARA

Cyndi Arwini Gunawan

Program Studi S1 Farmasi Fakultas Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada

Abstract

Breast cancer is one of the leading causes of cancer death in Indonesia. This study aims to synthesize a 5-FU derivative compound, namely 5-Fluoro-N1,N2-bis(4-methylbenzoyl)-2,4-dioxypyrimidine-1,3(2H,4H)-bis(carbothioamide). Methods: sonication, characterization, pharmacokinetic prediction, toxicity and computational studies. The synthesis process was carried out using the reaction between 5-fluorouracil, KSCN, and 4-methylbenzoyl in acetonitrile solvent. Results: The results of the synthesis of the purity test of the melting point of 5-Fluoro-N1,N2-Bis(4-Methylbenzoyl), 2,4-Dioxypyrimidine-1,3(2H,4H) Bis(Carbothioamide) were 380-390°C, 5-Fluorouracil 278-280°C and KSCN 216-218°C and produced 1 spot on the TLC plate. The UV-Vis spectrum showed a hypsochromic shift with a λ_{max} of 268 nm, absorption of C-Cl, C-N and -NH with wave numbers of 745.5 cm^{-1} , 1244 cm^{-1} and 3344 cm^{-1} . In silico studies were conducted using molecular docking and molecular dynamics methods on the thymidylate synthase receptor (PDB: 6QXG and 6QGG), showing that the synthesized compounds have better binding affinity than the reference ligand (5-FU). ADMET prediction using pkCSM showed good pharmacokinetic and toxicity profiles. Conclusion: this compound has the potential to be a more effective anti-breast cancer candidate than 5-FU.

Keywords : Breast Cancer, Computational Studies, Syntesis