

Zulqaida, Salma, 2017, Desain, Sintesis dan Molecular Docking Senyawa Turunan Dihidropirimidinon Sebagai Antikanker. Tesis dibawah bimbingan Dr. Hery Suwito, M. Si. dan Dr. Alfinda Novi Kristanti, DEA, Departemen Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga.

ABSTRAK

Kanker merupakan salah satu permasalahan kesehatan utama di dunia. Hal ini dikarenakan kasus dan kematian akibat kanker selalu meningkat setiap tahunnya. Oleh karena itu penelitian untuk menemukan senyawa antikanker masih dibutuhkan. Salah satu senyawa yang berpotensi sebagai antikanker adalah turunan dihidropirimidinon. Dihidropirimidinon berkerja sebagai inhibitor protein Eg5, suatu protein target yang potensial untuk kemoterapi kanker. Pada penelitian ini telah berhasil disintesis delapan senyawa turunan dihidropirimidinon yang memiliki substituen cincin aromatik yang berbeda yaitu DHPM 1-8. Sintesis dilakukan menggunakan reaksi multikomponen Biginelli dengan dua macam katalis yang berbeda, yaitu pTSA dan TEAA. Sintesis dengan menggunakan katalis pTSA menghasilkan rendemen yang lebih baik dibandingkan TEAA yaitu sebesar 36,8-74,9%. Struktur DHPM 1-8 ditentukan dengan menggunakan FT-IR, HR-ESI-MS, serta ^1H dan ^{13}C NMR. Analisis molecular docking dilakukan pada DHPM 1-8 terhadap protein Eg5 menggunakan program AutoDock4. Hasil analisis docking menunjukkan energi ikatan yang terjadi antara molekul target dan protein Eg5 bernilai negatif, sehingga pembentukan kompleks terjadi secara spontan. Aktivitas antikanker dianalisis secara in vitro melalui uji MTT terhadap sel kanker payudara T47D dan sel kanker serviks HeLa. Hasil uji menunjukkan bahwa senyawa DHPM 4 menunjukkan aktivitas antikanker terbaik terhadap sel T47D dengan nilai IC_{50} sebesar 32,105 $\mu\text{g/mL}$, sementara untuk sel HeLa, molekul target DHPM 5 menunjukkan aktivitas terbaik dengan nilai IC_{50} sebesar 1,935 $\mu\text{g/mL}$.

Kata kunci : Turunan dihidropirimidinon, reaksi Biginelli, antikanker, molecular docking