



PERAN KIMIA MEDISINAL DALAM PENGEMBANGAN OBAT ANTI KANKER

Saeful Amin¹, Fauziah Meithasari²

(^{1,2}) Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

✉ Corresponding author:
fauziah.meithasarii@gmail.com

Abstrak

Dengan penekanan pada pembuatan, sintesis, dan penyempurnaan zat bioaktif yang dapat secara selektif menargetkan sel kanker, kimia medis sangat penting untuk pengembangan obat anti-kanker. Disiplin ini memungkinkan untuk mengidentifikasi senyawa dengan aktivitas antikanker yang kuat dan efek samping minimal dengan menggunakan pendekatan dan mekanisme kerja berbasis struktur. Untuk meningkatkan kemanjuran dan selektivitas obat-obatan, berbagai metode kontemporer digunakan, termasuk desain berbantuan komputer, penelitian farmakokinetik, dan perubahan struktural kimia. Selain itu, kemajuan dalam kimia medis telah menciptakan peluang untuk menciptakan perawatan kanker yang lebih akurat. Tujuan dari penelitian ini adalah merancang dan memsintesis senyawa baru dengan aktivitas yang lebih baik dibandingkan dengan obat yang sudah ada, menguji aktivitas sitotoksik senyawa secara *in vitro* pada sel kanker dan menganalisis hubungan struktur-aktivitas untuk menemukan senyawa. Metode yang digunakan pada penelitian ini yaitu metode memodifikasi struktur senyawa, uji aktivitas biologis (*in vitro* & *in vivo*) dan analisis qsar. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa 1-(4-tert-butilbenzoioksi) urea memiliki aktivitas sitotoksik yang lebih tinggi dibandingkan 1-(benzoioksi)urea dan hidroksiurea. Nilai dari senyawa ini adalah 59,15 µg/mL, lebih rendah dibandingkan senyawa pembanding lainnya (hidroksiurea: 430,21 µg/mL), yang berarti senyawa ini lebih efektif dalam membunuh sel kanker, beberapa turunan N-benzoyl-N'-(4-fluorophenyl) thiourea menunjukkan kemungkinan efek mutagenik, sehingga aspek toksisitas perlu diperhatikan.

Kata Kunci: Kimia Medisinal, Pengembangan Obat, Anti Kanker

Abstract

With an emphasis on the generation, synthesis, and refinement of bioactive substances that can selectively target cancer cells, medicinal chemistry is essential for the development of anti-cancer drugs. This discipline makes it possible to identify compounds with potent anticancer activity and minimal side effects by using structure-based approaches and mechanisms of action. To improve the efficacy and selectivity of drugs, various contemporary methods are utilized, including computer-aided design, pharmacokinetic research, and chemical structural changes. In addition, advances in medicinal chemistry have created opportunities to create more accurate cancer treatments. The aim of this study is to design and synthesize new compounds with better activity compared to existing drugs, test the cytotoxic activity of compounds *in vitro* on cancer cells, and analyze structure-activity relationships to find compounds. The methods used in this research are the method of modifying the structure of compounds, biological activity tests (*in vitro* & *in vivo*), and QSAR analysis. The results showed that the compound 1-(4-tert-butylbenzoyloxy) urea has higher cytotoxic activity than 1-(benzoyloxy)urea and hydroxyurea. The value of this compound is 59.15 µg/mL, lower than the other comparator compounds (hydroxyurea: 430.21 µg/mL), which means that this compound is more effective in killing cancer cells, some N-benzoyl-N'-(4-fluorophenyl) thiourea derivatives show possible mutagenic effects, so toxicity aspects need to be considered.

Keywords: Medicinal Chemistry, Drug Development, Anti-cancer

PENDAHULUAN

Kanker adalah salah satu penyakit yang membunuh orang di seluruh dunia. perkembangan adalah penyebab kanker, yang tidak diturunkan. Faktor genetik dapat berkontribusi terhadap 18% risiko kanker payudara. Kemoterapi, terapi radiasi, dan pembedahan saat ini merupakan terapi kanker yang paling sering digunakan. Tamoxifen, trastuzumab, dan siklofosfamid saat ini merupakan kombinasi obat kemoterapi lini pertama untuk kanker payudara. Penggunaan siklofosfamid, tamoxifen, dan trastuzumab dapat menimbulkan efek samping negatif pada tubuh, termasuk sakit kepala, mual, kerontokan rambut, dan penurunan gairah seksual, terutama pada pria. Meskipun efek samping mungkin terjadi pada obat-obatan yang dibuat dari bahan alami, efek samping yang ditimbulkan biasanya ringan dan tidak berbahaya (Amin, Abidin, and Fathurohman 2024). Perluasan layanan kesehatan masyarakat, khususnya di industri farmasi, mengharuskan peningkatan kemahiran apoteker. Kimia obat adalah salah satu disiplin ilmu yang harus dikuasai oleh seorang apoteker. Disiplin ilmiah yang relatif baru, kimia obat pertama kali diajarkan di pendidikan tinggi farmasi pada tahun 1990-an. Siklus ini berusaha untuk memastikan kemanjuran antikanker senyawa dan interaksi ikatan yang terjadi dengan reseptor kanker payudara. Kanker payudara adalah penyakit dengan tingkat kematian tertinggi kedua (Amin et al. 2024).

Menurut (Ananto, Muliasari, and Hadisaputra 2020) kanker adalah penyakit berbahaya yang dapat menyerang dan membunuh suatu bangsa karena penyakit ini disebabkan oleh perkembangan sel yang tidak terkendali di bagian tubuh yang ganas. Dengan perkiraan 2,3 juta kasus baru, atau 11,7% dari seluruh kasus kanker, kanker payudara telah mengambil alih posisi kanker paru sebagai penyakit yang paling umum didiagnosis pada wanita. Banyak pilihan terapi baru untuk pengobatan kanker yang tersedia, tetapi semuanya rumit dan memiliki banyak efek samping. Oleh karena itu, penelitian di bidang kimia produk alami, desain obat, dan pengembangan obat menjadi semakin penting untuk menciptakan obat antikanker yang efektif dan memiliki efek samping yang lebih sedikit (Amin, Aryanti, and Aprilia 2023).

Menurut (Hutapea et al. 2021) kimia medisinal adalah ilmu yang merupakan cabang dari ilmu kimia dan biologi yang digunakan untuk memahami dan menjelaskan mekanisme kerja obat. Sebagai dasar, ilmu ini mencoba untuk membangun hubungan antara struktur kimia dan aktivitas biologis obat, serta menghubungkan perilaku biodinamik melalui sifat fisik dan reaktivitas kimia senyawa obat. Kimia medisinal melibatkan isolasi, karakterisasi, dan sintesis senyawa yang digunakan dalam pengobatan, untuk mencegah dan mengobati penyakit serta menjaga kesehatan. Pencarian, penemuan, desain, identifikasi, dan produksi senyawa aktif biologis (obat), metabolisme obat, interpretasi bagaimana obat berfungsi pada tingkat molekuler, dan studi tentang hubungan struktur-aktivitas-yaitu, hubungan antara struktur kimia senyawa dan aktivitas farmakologis-adalah area studi dalam kimia obat, menurut IUPAC (2019). Kimia obat, menurut Nogrady dan Weaver (2018), adalah ilmu terapan yang berfokus pada pembuatan molekul terapeutik yang membantu dalam pengobatan penyakit serta merancang atau menemukan senyawa entitas kimia baru (NCE) dan mengoptimalkannya. Kemampuan untuk merancang dan mensintesis molekul baru, menentukan bagaimana molekul tersebut berinteraksi dengan reseptor (makromolekul biologis seperti protein atau asam nukleat), menjelaskan hubungan antara struktur dan aktivitas biologis, memastikan penyerapan dan distribusi senyawa di seluruh tubuh, dan menilai perubahan metabolisme, semuanya diperlukan oleh ahli kimia obat untuk mencapai hal ini. (Hardjono 2018) menyampaikan bahwa ruang lingkup kimia medisinal adalah sebagai: Isolasi senyawa dari alam atau sintesis molekul baru; Investigasi hubungan struktur senyawa dari alam atau senyawa sintetik dengan aktivitas biologisnya; Menjelaskan proses interaksi senyawa dengan reseptor dari berbagai variasi, termasuk enzim dan DNA; Menentukan sifat-sifat absorpsi, transportasi, dan distribusi

senyawa obat; Studi perubahan transformasi metabolik, ekskresi dan toksisitas dari senyawa obat; Studi rancangan obat yang rasional.

Nama lain untuk kimia obat adalah Kimiaterapi (Chimie Therapeutique), Farmakokimia (Farmakokimia, Farmakokimia), dan Kimia Farmasi (Kimia Farmasi, Pharmaceutische Chemie, Arzneimittelforschung). Kimia komputasi, kimia fisik, kimia organik, kimia analitik, biologi molekuler, biofarmasetika dan farmakokinetik, farmasi, farmakognosi, farmakologi, toksikologi, mikrobiologi, biomedis, biokimia, statistika, serta simulasi komputer dan teknik visualisasi merupakan komponen dari kimia medis, yang merupakan bidang yang bersifat multidisipliner (Kesuma et al. 2018). Mengenai pembuatan obat, manusia telah menggunakan tanaman dan racun untuk tujuan pengobatan selama ribuan tahun. Namun, orang tidak menganggap serius tugas memisahkan dan memurnikan komponen aktif dalam tanaman hingga pertengahan tahun 1800-an. Saat ini, merancang perubahan struktur pada senyawa induk dengan aktivitas yang sudah mapan merupakan salah satu prosedur pengembangan senyawa yang digunakan untuk membuat obat baru. Secara umum, senyawa yang perlu dibuat memiliki kualitas yang tidak diinginkan, seperti aktivitas yang rendah, kurangnya spesifisitas, efek samping yang signifikan, ketidakstabilan, waktu paruh yang pendek, atau rasa dan bau yang tidak menyenangkan. Pengembangan obat sangat mahal karena dimulai dengan uji coba. Desain obat dilakukan untuk mengurangi faktor coba-coba (Fadilla et al. 2018).

Kanker adalah penyakit yang umum terjadi di negara-negara miskin seperti halnya di tempat lain. Pada tahun 2012, lebih dari 8,2 juta orang meninggal akibat kanker. Menurut International Agency for Research on Cancer (IARC), yang menggunakan data GLOBOCAN, terdapat 8.201.575 kematian akibat kanker dan 14.067.894 kasus baru kanker di seluruh dunia pada tahun 2012 (Arsianti, Kedokteran, and Indonesia 2023). Kanker paru-paru, hati, perut, kolorektal, dan payudara adalah penyebab utama kematian terkait kanker setiap tahunnya. Ketika usia diperhitungkan, persentase kasus baru kanker payudara, kanker prostat, dan kanker paru-paru adalah yang terbesar, yaitu masing-masing sebesar 43,3%, 30,7%, dan 23,1%. Ketika usia diperhitungkan, dua kanker paling umum yang menyebabkan kematian adalah kanker paru-paru dan payudara. Prevalensi kanker paru pada pria adalah 34,2%, sedangkan angka kematian akibat kanker paru pada pria adalah 30,0%. Kanker payudara terus memimpin populasi perempuan dalam hal kasus baru (43,3%) dan kematian akibat kanker (12,9%) (Santosa and Kesuma 2018). Tujuan dari penelitian ini adalah merancang dan memodifikasi senyawa baru dengan aktivitas yang lebih baik dibandingkan dengan obat yang sudah ada, menguji aktivitas sitotoksik senyawa secara in vitro pada sel kanker dan menganalisis hubungan struktur-aktivitas untuk menemukan senyawa dengan efek samping minimal (Simanjuntak and Roza 2021).

METODE PENELITIAN

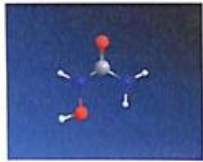
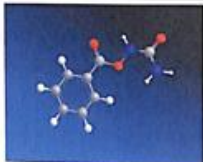
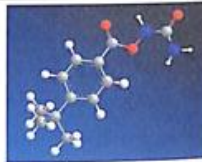
Penelitian ini menggunakan metode memodifikasi struktur senyawa, uji aktivitas biologis (in vitro & in vivo) dan analisis qsar. Mengubah struktur bahan kimia yang berasal dari 1-(benzoiloksi)urea dan menilai seberapa besar sitotoksiknya terhadap sel Hela. mengubah struktur turunan benzoil-N, N'diethylurea dan menilai kemanjurannya terhadap sel kanker payudara, serta mengubah struktur molekul baru N, N'-dialkilbenzoilurea untuk pembuatan obat antikanker.

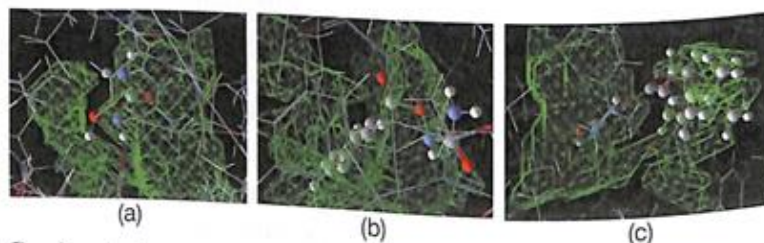
Senyawa baru turunan N-(alicyclicamotioil) benzamida sebagai kandidat terapi antikanker paten dan hubungan aktivitas sitotoksik kuantitatif turunan N-(alicyclicamotioil) benzamida terhadap sel kanker payudara diperoleh dengan memodifikasi struktur dan pengujian in vitro.

Uji Aktivitas Pada Sel Kanker

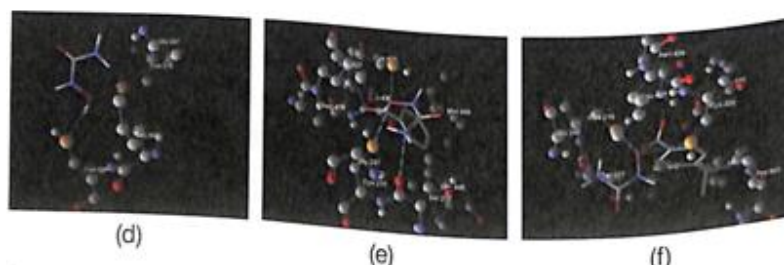
Uji aktivitas pada sel kanker adalah serangkaian tes yang digunakan untuk menentukan seberapa besar suatu zat, pengobatan, atau perawatan dapat memengaruhi sel kanker. Beberapa teknik ilmiah digunakan untuk mengevaluasi potensi terapeutik suatu zat atau metode terhadap sel kanker sambil membahas uji aktivitas pada sel kanker.

Tabel 1. 1 Hasil Modifikasi Struktur Turunan 1-(benzoiloksi) urea

		
Hidroksiurea	1-(Benzoiloksi)urea	1-(4- <i>tert</i> -Butilbenzoiloksi) urea
(Obat antikanker)	(Senyawa penuntun/induk)	(Modifikasi senyawa induk)
logP = -1,8	logP = 0,566	logP = 2,33
RS = - 43.3565 kcal/mol	RS = - 79.9432 kcal/mol	RS = - 91.4471 kcal/mol
IC ₅₀ = 430,21 µg/mL	IC ₅₀ = 76,38 µg/mL	IC ₅₀ = 59,15 µg/mL



Gambar 1. 1 Hidrouksiurea, b) 1-(benzoiloksi) urea, c) 1-(4-*tert*-butilbenzoiloksi) urea pada cavity2 reseptor/sel target 2EUD



Gambar 1. 2 Ikatan Hidrogen Antara 2EUD dengan Hidroksiurea (d), 1-(benzoiloksi)urea (e) dan 1-(4-*tert*-butilbenzoiloksi)urea (f), dalam gambar tersebut

Tabel 1 menunjukkan bahwa target molekul obat antikanker yang akan diproduksi adalah hidroksiurea, obat antikanker yang saat ini sedang digunakan. Selanjutnya, temukan bahan kimia induk atau senyawa timbal yang akan dikembangkan lebih lanjut. Karena 1-(benzoiloksi) urea memiliki nilai log P yang lebih tinggi daripada hidroksiurea, maka molekul penuntunlah yang akan digunakan. Ini lebih larut dalam lemak dan lebih mudah melewati dinding sel jika nilai log P lebih tinggi. Setelah itu, 1-(4-*tert*-butilbenzoiloksi) urea, yang memiliki nilai log P yang lebih tinggi daripada 1-(benzoiloksi) urea, disubstitusikan sebagai bahan kimia pemandu.

Nilai RS (= Rerank Score) menunjukkan aktivitas senyawa yang berubah, yang harus diprediksi karena log P saja tidak cukup untuk mensintesisnya. Energi ikatan antara ligan atau obat dan reseptor ditunjukkan oleh nilai RS. Energi ikatan yang dibutuhkan menurun seiring dengan menurunnya nilai RS. Dimungkinkan untuk mengantisipasi bahwa obat akan memiliki aktivitas yang lebih baik jika energi ikatannya berkurang karena akan membentuk koneksi yang lebih stabil dengan reseptor.

Menurut Tabel 1, 1-(4-*tert*-butilbenzoiloksi) urea memiliki nilai RS yang lebih rendah daripada 1-(benzoiloksi) urea dan hidroksiurea. Oleh karena itu, 1-(4-*tert*-butilbenzoiloksi) urea diharapkan memiliki aktivitas sitotoksik yang lebih besar daripada hidroksiurea dan aktivitas yang lebih besar daripada 1-(benzoiloksi) urea. Molekul ini diproduksi, dimurnikan, dan strukturnya dijelaskan setelah aksi sitotoksiknya diprediksi. Selain itu, memprediksi kualitas fisikokimia, farmakokinetik, dan toksikologi suatu senyawa sama pentingnya dengan memprediksi aktivitasnya. Pada tahun 2016, Hardjono telah memprediksi sifat fisikokimia, farmakokinetik, toksisitas, dan aktivitas 23 senyawa yang merupakan turunan dari N-benzoil-N-(4-fluorofenil) tiourea. Data prediksi aktivitas sitotoksik dan toksisitas ditampilkan pada Tabel 1.2.

Tabel 1. 2 Prediksi toksisitas dan aktivitas sitotoksik (Rerank Score) senyawa turunan N-benzoil-N'-(4-fluorofenil)

No	Nama Senyawa	Toksistas		Aktivitas Rerank Score
		Ames Toxicity	LD50 (mg/kg)	
1.	N-Benzoil-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-116,17
2.	N-(4-Metilbenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-123,64
3.	N-(4-Propilbenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-133,88
4.	N-(4-tert-Butilbenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-133,25
5.	N-(4-Pentilbenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-139,05
6.	N-(4-Heksilbenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-147,46
7.	N-(4-Hidrosibenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Ya	2885	-122,88
8.	N-(4-Metoksibenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-124,81
9.	N-(4-Etoksibenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-139,88
10.	N-(4-Butoksibenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-145,74
11.	N-(4-Heksiloksibenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2850	-128,32
12.	N-(4-Klorometilbenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-131,49
13.	N-(4-Fluorosulfonilbenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Ya	2885	-122,92
14.	N-(4-Iodobenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-124,41
15.	N-(4-Nitrobenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Ya	2850	-122,18
16.	N-(4-Aminobenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Ya	2885	-128,53
17.	N-(4-Dimetilaminobenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2885	-127,45
18.	N-(4-Isosianatobenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Ya	2885	-129,06
19.	N-(4-Fenilazobenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Ya	2885	-152,83
20.	N-(4-Asetoksibenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2850	-133,31
21.	N-(4-Trifluoroasetilbenzoil)-N'(4-fluorofenil)tiourea	Tidak	2850	-140,29
22.	Senyawa Pembanding	Ya	2885	-99,78

Alat online Protox digunakan untuk mengklasifikasikan toksisitas senyawa menurut Globally Harmonized System (GSH) dan melakukan pengujian toksisitas in silico per oral pada tikus (LD) untuk menyelesaikan prediksi toksisitas senyawa turunan N-benzoil-N-(4-fluorofenil)-tiourea. Jumlah bahan kimia yang dapat membunuh 50% dari kelompok hewan percobaan dikenal sebagai dosis letal (LD). Tabel 1.2 menunjukkan bahwa senyawa yang dihasilkan dari N-benzoil-N-(4-fluorofenil)-tiourea memiliki proyeksi nilai LD pada tikus mulai dari 2850 hingga 2885 mg/kg. Nilai-nilai ini termasuk toksisitas kelas 5 GSH, yang menunjukkan bahwa bahan kimia tersebut memiliki dampak toksisitas akut yang sedang. Pada dosis ini, kelas toksisitas 4 - yang menunjukkan toksisitas yang relatif rendah - termasuk dalam tabulasi kelas toksisitas Hodge dan Sterner (1949).

Nilai Rerank Score (RS) dari senyawa yang dihasilkan dari N-benzoil-N-(4-fluorofenil)tiourea bervariasi dari -116,17 hingga -152,83 kkal / mol, seperti yang ditunjukkan pada Tabel 1.2. Aktivitas senyawa dapat diperkirakan berdasarkan nilai-nilai ini. Semua senyawa yang diteliti diharapkan memiliki aktivitas sitotoksik terhadap enzim Sirtuin1, yang lebih tinggi daripada senyawa pembanding dan senyawa induk N-benzoil-N-(4-fluorofenil)tiourea (RS 116,17 kkal/mol), sesuai dengan nilai RS senyawa pembanding 415,601 (No. 24) sebesar -99,78 kkal/mol. Dengan energi ikatan paling kecil, atau nilai RS, sebesar -152,83, senyawa No. 19, N-(4-fenilazobenzoil)-N-(4-fluorofenil)-tiourea, diperkirakan memiliki aksi sitotoksik maksimum.

Mayoritas reaksi metabolisme diketahui mencakup mekanisme oksidasi. Hati adalah lokasi utama untuk sitokrom P450, enzim detoksifikasi yang sangat penting dalam tubuh.

Enzim ini memfasilitasi ekskresi obat-obatan dan zat organik asing lainnya dengan cara mengoksidasinya. Jus jeruk bali dan penghambat lain dari enzim ini dapat mengubah metabolisme obat, yang membuatnya tidak sesuai untuk digunakan dengan enzim sitokrom p450. Sitokrom P450 diwakili dalam penelitian ini oleh isoform sitokrom P2D6 (CYP2D6), oleh karena itu sangat penting untuk mengevaluasi kapasitas senyawa untuk menghambatnya. Karena semua senyawa yang berasal dari N-benzoil-N-(4-fluorofenil) tiourea tidak memblokir atau mempengaruhi enzim CYP2D6, seperti yang ditunjukkan pada Tabel 3, dapat diasumsikan bahwa enzim P450 biasanya akan memetabolisme senyawa turunannya. Substrat Total Clearance (CLTOT) dan Renal Organic Cation Transporter 2 (OCT2) dapat diukur untuk memperkirakan proses ekskresi zat. CLTOT menggabungkan pembersihan ginjal (ekskresi melalui ginjal) dengan pembersihan hati (metabolisme 22di hati dan empedu). Ini ada hubungannya dengan ketersediaan hayati, dan mencari tahu jumlah dosis untuk mencapai konsentrasi keadaan stabil sangat penting.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Tabel 1 menampilkan hasil uji aktivitas sitotoksik; khususnya, nilai IC₅₀ ICs adalah konsentrasi zat yang mampu membunuh setengah dari sel kanker. Menurut temuan penelitian, molekul pemandu 1- (benzoiloxo) urea memiliki IC 76,38 µg/mL dan 1-(4-tert-butylbenzyloxy) urea memiliki IC 59,15 µg/mL. Sebaliknya, obat antikanker hidroksiurea memiliki IC 430,21 µg/mL. Ini menunjukkan bahwa urea 1-(4-tert-butylbenzoxyloxy) urea lebih aktif daripada urea 1-(benzoxyloxy) in vitro dan memiliki aktivitas sitotoksik yang lebih besar daripada hidroksiurea. Memilih target, meneliti mekanisme kerjanya, memprediksi jenis fistomi, ADME, aktivitasnya, dan toksisitasnya, mensintesis senyawa tertentu, dan menguji aktivitas baik secara in vitro maupun in vivo adalah langkah pertama yang paling penting dalam pengembangan obat. Oleh karena itu, diperlukan sumber daya yang kompeten, komputer yang kuat, program in silico yang komprehensif, bahan dan teknik sintesis, alat analisis kimia yang canggih, dan alat dan prosedur penentuan aktivitas in vitro dan in vivo yang komprehensif. Menurut pengamatan saya kita di Indonesia ini bisa meningkatkan peran kimia medisinal dalam pengembangan obat karena mempunyai kekuatan, antara lain yaitu adanya ahli kimia medisinal yang kompeten di beberapa perguruan tinggi, pustaka tentang Kimia Medisinal yang mudah didapatkan, para peneliti banyak melakukan penelitian tentang pengembangan obat, kemudahan untuk mendapatkan komputer yang memenuhi persyaratan, kemudahan untuk mendapatkan beberapa program in silico melalui internet, banyak senyawa aktifisenyawa induk yang bisa diperoleh dari alam, semi sintesis dan sintesis.

Dari pengamatan maupun pengalaman selama ini maka terdapat beberapa kelemahan atau kekurangan, antara lain yaitu belum semua perguruan tinggi farmasi memperdalam ilmu kimia medisinal, mahalnya harga alat analisis kimia yang diperlukan, belum semua perguruan tinggi mempunyai alat canggih untuk analisis kimia, bahan dasar dan pelarut yang dibutuhkan dalam sintesis masih harus mendatangkan dari luar negeri dan harganya mahal, program Sewa dalam silico yang mahal, proses mendatangkan bahan dasar dan peran indow diperlukan belum lancar. to activate. pelarut yang diperlukan belum lancar.

Dengan memperhatikan kekuatan dan kelemahan di atas, kami memberikan masukan yaitu Kimia medisinal merupakan cabang ilmu yang harus diajarkan dan diperdalam pada pendidikan tinggi farmasi, untuk menunjang penelitian pengembangan obat di perguruan tinggi perlu adanya alat-alat sintesis yang baik, program in silico yang terkini serta peralatan analisis kimia yang canggih, pemerintah hendaknya mempermudah perizinan dan menurunkan biaya untuk memasukkan bahan kimia yang diperlukan, pemerintah hendaknya memperkuat industri bahan kimia di dalam negeri, untuk mengurangi ketergantungan terhadap impor.

SIMPULAN

Kimia medisinal memainkan peran krusial dalam pengembangan obat anti kanker dengan perencanaan dan mensintesis molekul yang dapat menargetkan sel kanker secara spesifik.

Melalui pendekatan berbasis struktur dan mekanisme aksi, kimia medisinal membantu mengoptimalkan efektivitas, selektivitas, dan keamanan obat. Inovasi dalam bidang ini, termasuk desain berbasis komputer, studi farmakokinetik, dan modifikasi struktur kimia, memungkinkan penemuan agen terapi yang lebih efektif dengan efek samping minimal. Dengan demikian, kemajuan dalam kimia medisinal terus mendorong pengembangan terapi kanker yang lebih presisi.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih sebesar-besarnya kepada semua pihak yang telah memberikan dukungan dalam penyusunan artikel ini. Terutama kepada Fakultas Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya atas fasilitas pembimbing dan keluarga dan sahabat kimia medisinal dan penemuan obat anti kanker.

DAFTAR PUSTAKA

- Amin, Saeful, Ade Triana Abidin, and Mochamad Fathurohman. 2024. "Prediksi In Silico Aktivitas Antikanker Payudara Dari Metabolit Sekunder Tanaman Babandotan (*Ageratum Conyzoides* L.)." 4: 267–82.
- Amin, Saeful, Riyan Aryanti, and Ade Yeni Aprilia. 2023. "Studi In Silico Senyawa Yang Terkandung Dalam Kulit Buah Manggis (*Garcinia Mangostana* L.) Sebagai Antikanker Payudara." *Prosiding Seminar Nasional Diseminasi Penelitian* 3(September): 2964–6154. <https://zlab.umassmei>.
- Amin, Saeful, Muhammad Fauzan, Maulana Zidane, and Mochamad Fathurrochman. 2024. "Studi Komputasi Potensi Anti-Kanker Payudara Dari Senyawa Bioaktif Daun Belimbing Wuluh." 4: 317–31.
- Ananto, Agus Dwi, Handa Muliasari, and Saprizal Hadisaputra. 2020. "Desain Senyawa Turunan Meisoindigo Baru Sebagai Anti Kanker Payudara (Design New Derivative of Meisoindigo as Antibreast Cancer)." *Jurnal Farmaseutik* 16(1): 9–15. doi:10.22146/farmaseutik.v16i1.43072.
- Arsianti, Ade, Fakultas Kedokteran, and Universitas Indonesia. 2023. "Pengembangan Obat Baru di Indonesia."
- Fadilla, Didi, Hanggara Arifian, Agung Rahmadani, and Rolan Rusli. 2018. "Kajian In Silico Senyawa Turunan Klorokalkon Sebagai Antikanker." *Proceeding of Mulawarman Pharmaceuticals Conferences* 7: 45–50. doi:10.25026/mpc.v7i1.293.
- Hardjono, Suko. 2018. "Peran Kimia Medisinal Dalam Pengembangan Obat Antikanker." : 1–40.
- Hutapea, Erlin E, Ida Musfiroh, Program Studi, Profesi Apoteker, Fakultas Farmasi, and Universitas Padjadjaran. 2021. "Aspek Kimia Medisinal Senyawa Xanton Sebagai Anti Kanker." *Farmaka* 18(1): 53–59.
- Kesuma, Dini, Siswandono Siswandono, Bambang Tri Purwanto, and Suko Hardjono. 2018. "Uji in Silico Aktivitas Sitotoksik dan Toksisitas Senyawa Turunan N-(Benzoil)-N'- Feniltiourea Sebagai Calon Obat Antikanker." *JPSCR: Journal of Pharmaceutical Science and Clinical Research* 3(1): 1. doi:10.20961/jpscr.v3i1.16266.
- Santosa, Harry, and Dini Kesuma. 2018. "Aktivitas Antikanker Senyawa N-Etil-N-Feniltiourea Secara In Silico dan In Vitro Pada Sel Kanker Payudara T47D dan Selektivitasnya Pada Sel Normal Vero." *Trusted Pharmacist for a Better Quality of Life*: 112–15.
- Simanjuntak, Alfrindah Priseilla, and Destria Roza. 2021. "Seminar Nasional Kimia Dan Pendidikan Kimia Iv." (Media weblog, motivasi belajar, hasil belajar dan ikatan kimia): 275–79.