



**Kampus
Merdeka**
INDONESIA JAYA

PROSIDING

SEMINAR NASIONAL KIMIA DAN PENDIDIKAN KIMIA #2

Prof. Dr. S. Loni, M.Pd.
"Membangun Negeri dari Sekolah"

"Peran Strategis Kimia Dan Pendidikan Kimia Terhadap Pengembangan Ilmu Pengetahuan Dan Teknologi Dalam Revolusi 4.0 Di Era New Normal"

11 DESEMBER 2021



Penerbit
FMIPA
Universitas Negeri Medan

ISBN: 978-602-9115-73-4

Prosiding

Seminar Nasional Kimia Dan Pendidikan Kimia #2

"Peran Strategis Kimia Dan Pendidikan Kimia Terhadap Pengembangan Ilmu Pengetahuan Dan Teknologi Dalam Revolusi 4.0 Di Era New Normal"

Diselenggarakan oleh:
Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Negeri Medan

Gedung Syawal Gultom Lt. 3
FMIPA UNIMED
(Virtual Conference)

11 Desember 2021

THE
Character Building
UNIVERSITY



Prosiding

Seminar Nasional Kimia Dan Pendidikan Kimia #2

Penanggung Jawab :

Prof. Dr. Fauziah Harahap, M.Si
Dr. Jamalum Purba, M.Si
Dr. Ayi Darmana, M.Si

Dewan Redaksi :

Dr. Ani Sutiani, M.Si
Drs. Jasmidi, M.Si
Dr. Zainuddin Muchtar, M.Si
Dr. Ahmad Nasir Pulungan, M.Sc

Reviewer :

Prof. Manihar Situmorang, M.Sc, Ph.D
Prof. Dr. Retno Dwi Suyanti, M.Si
Prof. Dr. Ida Duma Riris, M.Si
Prof. Dr. Ramlan Silaban, MS
Dr. Asep Wahyu Nugraha, M.Si
Dr. Iis Siti Jahro, M.Si
Dr. Destria Roza, M.Si
Dr. Junifa Laila Sihombing, M.Sc
Dr. Lisnawaty Simatupang, M.Si
Dr. Herlinawati, M.Si
Nora Susanti, S.Si., Apt., M.Sc
Moondra Zubir, Ph.D

Editor :

Haqqi Annazili Nasution, S.Pd., M.Pd
Ricky Andi Syahputra, S.Pd., M.Sc
Feri Andi Syuhada, S.Pd., M.Pd
Susilawati Amdayani, S.Si., M.Pd
Siti Rahmah, S.Pd., M.Sc

Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Negeri Medan
Jl. Willem Iskandar Psr. V Medan Estate, Medan 20221



SUSUNAN KEPANTIAN

SEMINAR NASIONAL KIMIA DAN PENDIDIKAN KIMIA#2

Jurusan Kimia FMIPA Universitas Negeri Medan

11 Desember 2021

PEMBINA

Dekan FMIPA UNIMED : **Prof. Dr. Fauziyah Harahap, M.Si**

PENGARAH

Wakil Dekan 1 FMIPA UNIMED : **Dr. Jamalum Purba, M.Si**

Wakil Dekan 2 FMIPA UNIMED : **Dr. Ani Sutiani, M.Si**

Wakil Dekan 3 FMIPA UNIMED : **Dr. Rahmatsyah, M.Si**

PENANGGUNGJAWAB

Ketua Jurusan KIMIA UNIMED : **Dr. Ayi Darmana, M.Si**

WAKIL PENANGGUNGJAWAB

Sekretaris Jurusan KIMIA UNIMED : **Drs. Jasmidi, M.Si**

KETUA

Dr. Ahmad Nasir Pulungan, S.Si., M.Sc

SEKRETARIS

Haqqi Annazili Nasution, S.Pd., M.Pd

BENDAHARA

Susilawati Amdayani, S.Si., M.Pd

SEKSI IT, WEB DAN PUBLIKASI

1. **Dr. Zainuddin M, M.Si (Koordinator)**
2. Siti Rahmah, S.Pd., M.Sc
3. Ricky Andi Syahputra, S.Pd., M.Sc

SEKSI ACARA DAN PRESENTASI

1. **Moondra Zubir, M.Si., Ph.D (Koordinator)**
2. Makharany Dalimunthe, S.Pd., M.Pd

SEKSI ABSTRAK, DAN MAKALAH

1. **Dr. Lisnawaty Simatupang, M.Si (Koordinator)**
2. Dr. Herlinawati, M.Si
3. Muhammad Isa Siregar, S.Si., M.Pd

SEKSI ADMINISTRASI DAN KESEKRETARIATAN

1. **Dr. Destria Roza, M.Si (Koordinator)**
2. Nora Susanti, S.Si., M.Sc., A.Pt

SEKSI BIDANG PERLENGKAPAN DAN DOKUMENTASI

1. **Risdo Gultom, S.Pd., M.Pd (Koordinator)**
2. Feri Andi Syuhada, S.Pd., M.Pd

KATA PENGANTAR

Puji syukur kami panjatkan kehadirat Allah SWT Tuhan Yang Maha Esa, karena atas Karunia dan Rahmat-Nya Prosiding Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 yang telah diselenggarakan oleh Jurusan Kimia FMIPA UNIMED pada tanggal 11 Desember 2021 melalui *Virtual Conference* dapat diselesaikan. Ucapan terima kasih kami sampaikan kepada seluruh pihak yang telah membantu dalam penyusunan prosiding ini.

Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia adalah seminar tahunan yang diselenggarakan oleh Jurusan Kimia Unimed. Pada Seminar ke dua ini mengambil tema **“Peran Strategis Kimia Dan Pendidikan Kimia Terhadap Pengembangan Ilmu Pengetahuan Dan Teknologi Dalam Revolusi 4.0 Di Era New Normal”**. Melalui kegiatan seminar ini berbagai hasil penelitian, ide dan pemikiran peneliti di bidang kimia, praktisi kimia dan pendidikan kimia telah dipresentasikan.

Prosiding ini memuat karya tulis terdiri dari berbagai hasil penelitian dalam bidang kimia dan pendidikan kimia. Makalah yang dimuat dalam prosiding ini meliputi makalah dari *keynote dan invited speaker*, makalah dari pemalakah utama dari bidang Kimia meliputi sub bidang Kimia Analitik, Kimia Orgnik dan Anorganik, Kimia Fisik dan Polimer, Biokimia dan Bioteknologi dan makalah utama Pendidikan Kimia.

Semoga penerbitan prosiding ini dapat bermanfaat baik untuk kalangan kimiawan, pengguna ilmu kimia dan pemerhati pendidikan kimia maupun pembaca lainnya dalam pengembangan penelitian dimasa akan datang. Akhir kata kepada semua pihak yang telah membantu, kami ucapkan terima kasih.

Medan, Juli 2022

Tim Editor

THE
Character Building
UNIVERSITY

SAMBUTAN KETUA PANITIA

Assalaamu'alaikum warahmatullahi wabarakaatuh,

Selamat pagi dan salam sejahtera untuk kita semua.

Pertama-tama marilah kita panjatkan puji syukur ke hadirat Allah SWT atas limpahan rahmat dan karunia-Nya, sehingga pada pagi hari ini kita dapat berkumpul untuk mengikuti acara Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 Jurusan kimia FMIPA UNIMED dengan tema “Peran Strategis Kimia dan Pendidikan Kimia Terhadap pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal”. Dengan menghadirkan Dr. Harry Firman, M.Pd (UPI), Prof. Dr. Karna Wijaya, M.Eng (UGM), Dr. Asep Wahyu Nugraha (UNIMED) sebagai *keynote speaker* dan Drs. Zulfan Mazaimi, M.Pd (Ketua PPSKI-Sumut), Dr. Eng. Yulia Eka Putri (Unand) dan Dr. Vivi Purwandari (Universitas Sarimutiara Indonesia) sebagai *invited speaker*.

Seminar Nasional ini diselenggarakan dengan tujuan untuk: 1) Mengkomunikasikan dan memfasilitasi interaksi professional antar komunitas kimia dan pendidikan Kimia di Indonesia untuk saling berbagai informasi dan 2) Meningkatkan kerjasama antara para pendidik, peneliti dan praktisi. Kegiatan Seminar Nasional ini diharapkan dapat menjadi forum pertemuan antara ilmuwan peneliti dalam bidang kimia, praktisi kimia, dan pendidikan kimia, serta *stake holder* lainnya untuk bekerjasama dan sharing terkait peran Strategis kimia dan pendidikan kimia Terhadap pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal. Untuk mencapai tujuan tersebut, kami panitia telah mengundang Dosen, peneliti, pendidik, mahasiswa dan pemerhati dalam bidang kimia dari berbagai instansi di wilayah tanah air. Undangan tersebut telah ditanggapi oleh registrasi peserta sebanyak 150 orang peserta dari berbagai kalangan dan wilayah Ujung Timur sampai Barat Indonesia dengan 86 peserta akan mempersentasikan makalahnya.

Akhir kata Kami panitia menyampaikan terimakasih kepada *keynote speaker* dan *invited speaker*, peserta dan pemakalah, juga segenap undangan kami atas peran sertanya dalam seminar ini. Panitia telah berusaha untuk mempersiapkan seminar ini dengan sebaik-baiknya, namun kami meminta maaf apabila terdapat kekurangan dalam pelayanan kami Kami. Kiranya kegiatan seminar nasional ini dapat memberikan manfaat bagi kita semua.

Wassalamu'alaikum warahmatullahi wabarakaatuh

Medan, 11 Desember 2021
Ketua Panitia ,

Dr. Ahmad Nasir Pulungan, M.Sc
NIP. 198106182012121005

SAMBUTAN KETUA JURUSAN

Assalaamu'alaikum warahmatullahi wabarakaatuh,

Selamat pagi dan salam sejahtera untuk kita semua.

Puji syukur ke hadirat Allah SWT atas limpahan rahmat dan karunia-Nya, sehingga kita dapat mengikuti acara Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 Jurusan kimia FMIPA UNIMED. Kami mengucapkan selamat datang kepada seluruh peserta seminar dan semoga kegiatan seminar ini dapat memberikan kontribusi bagi pengembangan ilmu Kimia dan Pendidikan Kimia. Kegiatan Seminar ini juga diharapkan dapat menjadivadah bagi ilmuwan peneliti dalam bidang kimia, praktisi kimia, dan pendidikan kimia, serta *stake holder* lainnya untuk bekerjasama dan sharing terkait peran Strategis kimia dan pendidikan kimia Terhadap pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal.

Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 tahun 2021 ini bertema” peran Strategis kimia dan pendidikan kimia Terhadap pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal” Dengan menghadirkan Dr. Harry Firman, M.Pd (UPI), Prof. Dr. Karna Wijaya, M.Eng (UGM), Dr. Asep Wahyu Nugraha (UNIMED) sebagai *keynote speaker* dan Drs. Zulfan Mazaimi, M.Pd (Ketua PPSKI-Sumut), Dr. Eng. Yulia Eka Putri (Unand) dan Dr. Vivi Purwandari (Universitas Sarimutiara Indonesia) sebagai *invited speaker*. Penyelenggaraan seminar nasional ini begitu penting bagi kami Jurusan Kimia FMIPA UNIMED dalam rangka meningkatkan peran serta mahasiswa dan dosen dalam kegiatan pertemuan ilmiah dan publikasi yang akan menunjang pada akreditasi Jurusan Kimia FMIPA UNIMED.

Saya selaku ketua Jurusan Kimia FMIPA UNIMED mengucapkan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada seluruh panitia yang telah bekerja keras untuk terselenggarakannya kegiatan seminar ini. Akhir kata, semoga apa yang menjadi tujuan dan harapan pada kegiatan Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia ini dapat terwujud serta dapat memberikan manfaat bagi kita semua.

Wassalamu'alaikum warahmatullahi wabarakaatuh.

Medan, 11 Desember 2021
Ketua Jurusan FMIPA UNIMED

Dr. Ayi Darmana, M.Si
NIP. 196608071990101001

SAMBUTAN DEKAN

*Assalamualaikum..W.Wbr.....*Salam Sejahtera bagi kita semua,

Puji syukur kehadiran Allah SWT, Tuhan Yang Maha Esa berkat rahmat dan karuniaNya kita dapat mengikuti kegiatan Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia#2 yang diselenggarakan oleh Jurusan Kimia FMIPA UNIMED. Kegiatan Seminar ini menghadirkan *keynote speaker* Dr. Harry Firman, M.Pd (UPI), Prof. Dr. Karna Wijaya, M.Eng (UGM), Dr. Asep Wahyu Nugraha (UNIMED), dan *invited speaker* Drs. Zulfan Mazaimi, M.Pd (Ketua PPSKI-Sumut), Dr. Eng. Yulia Eka Putri (Unand) dan Dr. Vivi Purwandari (Universitas Sarimutiara Indonesia). Kami mengucapkan selamat datang kepada seluruh peserta seminar dan semoga kegiatan ini memberikan kontribusi positif bagi pengembangan Ilmu Kimia dan Pendidikan kimia.

Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia Jurusan Kimia FMIPA UNIMED telah ditetapkan sebagai kegiatan rutin yang diselenggarakan setiap tahunnya. Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan kimia#2 tahun 2021 ini mengangkat tema “ Peran Strategis Kimia dan Pendidikan Kimia terhadap Pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi dalam Revolusi Industri 4.0 di Era New Normal”. Meski kita saat ini masih belum keluar dari masa pandemik CoVID-19, namun perkembangan teknologi yang begitu pesat di era industri 4.0 telah melahirkan peluang dan tantangan baru. Karenanya penelitian dalam bidang Kimia dan teknik pembelajarannya harus dapat berkontribusi pada peningkatan dan pengembangan ketrampilan digital (ICT) dalam proses pembelajaran, dan juga mampu mengintegrasikan teknologi tersebut dalam kegiatan penelitian dilaboratorium kimia. Peningkatan dan pengembangan tersebut tentu saja baik ditinjau dari sisi materi, teknologi pembelajaran, kegiatan penelitian, dan pembentukan karakter. Melalui kegiatan Seminar Nasional ini, Kami berharap bapak/ibu dapat bertukar pikiran untuk dapat mensinergikan hasil-hasil penelitian dikampus dengan kebutuhan masyarakat dan kolaborasi dengan stakeholder dan industri dalam rangka menterjemahkan tema diatas.

Akhir kata, Kami mengucapkan terimakasih kepada seluruh panitia yang telah bekerja keras untuk terselenggaranya kegiatan seminar ini.

Medan, 11 Desember 2021
Dekan FMIPA UNIMED

Prof. Dr. Fauziyah Harahap, M.Si
NIP. 1966072811991032002

DAFTAR ISI

| | |
|------------------------|------|
| SUSUNAN KEPANITIAAN | iii |
| KATA PENGANTAR | iv |
| SAMBUTAN KETUA PANITIA | v |
| SAMBUTAN KETUA JURUSAN | vi |
| SAMBUTAN DEKAN | vii |
| DAFTAR ISI | viii |

Keynote & Invited Speaker

| | |
|---|-------|
| <i>Pendidikan Kimia 4.0</i> Harry Firman | 1-7 |
| <i>Riset Inovasi Nanomaterial Untuk Pembangunan Berkelanjutan</i> Karna Wijaya | 8-10 |
| <i>Penentuan Karakteristik Transisi Spin Pada Kompleks $[Fe_4(Htrz)_{10}(Trz)_5]Cl_3$ Menggunakan Perhitungan Kimia Komputasi Dengan Berbagai Fungsi/ Basis Set</i> Asep Wahyu Nugraha, Ani Sutiani, Muhamad A Martoprawiro dan Djulia Onggo..... | 11-17 |
| <i>SrTiO₃ Nanokubus: Material Penghasil Energi Listrik Alternatif (Termoelktrik)</i> Yulia Eka Putri, dkk..... | 18-18 |
| <i>Karakteristik Grafena dari Limbah Padat Kelapa Sawit</i> Vivi Purwandari | 19-23 |
| <i>Implementasi Pembelajaran Stem Berbasis Lingkungan Dalam Meningkatkan Penguasaan Konsep Sistem Koloid, Aktivitas Dan Kreativitas Peserta Didik SMAN. 2 Rantau Utara</i> Zulfan Mazaimi, Irma Sary, Fitriana Ritonga | 24-31 |

Makalah Kimia

| | |
|--|-------|
| <i>Studi Awal Konversi Limbah Pelepah Kelapa Sawit Menjadi Bio-Oil Dengan Teknik Semi Fast Pyrolysis sebagai Sumber Bahan bakar Alternatif</i> Muhammad Irvan Hasibuan, dkk..... | 32-38 |
| <i>Review Artikel: Studi Potensi Biomassa Menjadi Bio-Oil Menggunakan metode Pirolisis sebagai sumber Energi Baru Terbaharukan</i> Hana Ria Wong, Muhammad Irvan Hasibuan, Agus Kembaren, Ahmad Nasir pulungan, Junifa Layla Sihombing..... | 39-46 |
| <i>Pengaruh Penambahan Cellulose Nanocrystal (CNC) Dari Kulit Durian Durio Zibethinus Murr Terhadap Karakteristik Bionanocomposite Edible Film Berbasis Gelatin</i> Yahya Indahsya, I Gusti Made Sanjaya..... | 47-57 |
| <i>Grafting Nanokomposit Karbon Nanotube Kitosan</i> Masdania Zurairah Siregar, Vivi Purwandari, Rahmad Rezeki..... | 58-62 |
| <i>Permodelan Molekul Senyawa Turunan 2-Aminokalkon Dengan Substitusi Pada Cincin B Sebagai Agen Antikanker</i> Sya sya Azzaythounah, Tico Guinnessha Samosir, Destria Roza..... | 63-70 |
| <i>Analisa Termal Bioplastik Dengan Bahan Pengisi Ekstrak Rambut Jagung</i> A Zukhruf Akbari, M Zaim Akbari, Gimelliya Saraih , Vivi Purwandari..... | 71-74 |

| | |
|--|---------|
| <i>HKSA Antikanker Turunan 4-Aminochalcon Terhadap HeLa Dengan Metode Semiempiris CNDO Dan Regresi Linear</i> Alfrindah Priscilla Br. Simanjuntak dan Destria Roza..... | 75-81 |
| <i>Kajian Senyawa Kb Sebagai Kanker Nasofaring Epidermoid Menggunakan Metode CNDO (Hyperchem) Dan Regresi Linear (SPSS)</i> Hidayani dan Destria Roza | 82-88 |
| <i>Pemurnian Sulfur Dengan Proses Sublimasi</i> Hammid Al Farras , Felix Valentino Sianturi | 89-92 |
| <i>Penentuan Kandungan Antioksidan Total dari Infusa Bayam Hijau (Amaranthus Hybridus L.) Hidroponik dan Konvensional dengan Metode MPM</i> Yefrida, Widuri Rosman dan Refilda | 93-98 |
| <i>Docking Molekular Potensi Anti Inflamasi Protein Iq5 dengan Senyawa Turunan Kurkumin</i> Nurul Hidayah, Ruth Yohana Saragih, Destria Roza | 99-103 |
| <i>Pengaruh Ekstrak Etanol Daun Sarang Banua (Clerodendrum fragran Vent Willd) Terhadap Kadar Triglycerida Serum Tikus Yang Diberi Pakan Tinggi Lemak</i> Yohana Stefani Manurung dan Murniaty Simorangkir | 104-109 |
| <i>Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Senyawa Turunan 4-Aminochalcone terhadap Human T-Leukimia (CEM)</i> Hasri Tri Maya Saragih, dan Destria Roza..... | 110-114 |
| <i>ReNyirih: INOVASI EKSTRAK KINANG BERBASIS SOCIOPRENEUR</i> Sri Adelila Sari, Elva Damayanti Lubis, Syafira Fatimah Rizqi, Yulia Ayu Utami Tarigan, DwiAntika Br, Nasution, Eny Setiadi Saragih | 115-119 |
| <i>Review Artikel: Karakterisasi dan Aktivitas Lisozim serta Aplikasinya sebagai Antibakteri</i> Agustin Dwi Ayuningsih dan Mirwa Adiprahara Anggarani | 120-125 |
| <i>HKSA Senyawa Turunan Metoksi-Aminokalkon Terhadap Murine Leukemia (L1210) Menggunakan Metode Semiempiris CNDO Dan Regresi Linear</i> Elfrida Siregar dan Destria Roza | 126-132 |
| <i>Hubungan Kuantitatif Stuktur-Aktivitas Senyawa Turunan Aminokalkon Pada Sel Murine Mammary Carcinoma (FM3A) Menggunakan Metode CNDO (Hyperchem) Dan Regresi Linear (SPSS)</i> Suria Bersinar Siahaan1 Destria Roza | 133-139 |
| <i>Analysis Of Crude Protein (PK) , Carbohydrate And Moisture Content (KA) Levels In Fresh Leaves Of Guatemala Grass (Tripsacum laxum) In The Low Plants, Secanggang District Langkat District</i> Nur Asyiah Dalimunthe dan Muhammad Usman | 140-143 |
| <i>Uji Efektivitas Antibakteri Nanogel Bahan Aktif Ekstrak Kayu Manis (Cinnamomum Burmannii) Terhadap Staphylococcus aureus</i> Hestina, Erdiana Gultom, Vivi Purwandari | 143-149 |
| <u>Makalah Pendidikan Kimia</u> | |
| <i>Analisis Media Pembelajaran di SMA Swasta Kwala Begumit Kelas XI Kota Binjai Pada Masa Pandemi Covid19</i> Elsa Febrina Tarigan, Nurfajriani, Zainuddin Muchtar..... | 150-154 |
| <i>Pengembangan Lembar Kerja Siswa (LKS) Elektronik Berbasis Android Dengan Pendekatan Contextual Teaching And Learning (CTL) Pada Materi Termokimia</i> Azizah Hawanif dan Feri Andi Syuhada | 155-164 |

| | |
|--|---------|
| <i>Pengembangan Lembar Kerja Siswa (LKS) Dengan Menggunakan Pendekatan Kontekstual Berbasis Multiple Representasi Pada Materi Laju Reaksi</i> Nurul Huda dan Feri Andi Syuhada | 165-172 |
| <i>Pengembangan Instrument Asessment Higher Order Thinking Skill (HOTS) Untuk Mengukur Kemampuan Berpikir Tingkat Tinggi Pada Materi Hidrolisis Garam</i> Alfi Rizkina Lubis, Ajat Sudrajat, Asep Wahyu Nugraha | 173-181 |
| <i>Analisis Model Rasch: Identifikasi Instrumen Tes Representasi Kimia Topik Materi Berdasarkan Kurikulum Cambridge</i> Mufti Muhammad Hamzah, E Eliyawati, Rika Rafikah Agustin | 182-188 |
| <i>Pengaruh Media Physics Education Technology (PhET) Terhadap Aktivitas Dan Hasil Belajar Siswa Pada Materi Bentuk Molekul</i> Suci Setia Crise Manullang, Lisnawaty Simatupang | 189-195 |
| <i>Pengaruh Macromedia Flash Berbasis Model Problem Based Learning Terhadap Motivasi dan Hasil Belajar Siswa SMA pada Materi Laju Reaksi Inki</i> Yun Lamtiur dan Lisnawaty Simatupang | 196-200 |
| <i>Pengaruh Penggunaan Media Pembelajaran Kimia Interaktif iSpring Presenter terhadap Hasil Belajar dan Motivasi Siswa pada Materi Laju Reaksi</i> Yoshe Vego Passarella Simarmata dan Ida Duma Riris | 201-211 |
| <i>Validasi dan Respon Media Video Animasi (PowToon) Berbasis Religius Pada Pembelajaran Ikatan Kimia</i> Ade Kurnia Putri Tanjung dan Ayi Darmana | 212-218 |
| <i>Pengembangan Model Pembelajaran Inovatif Berbasis Proyek Berorientasi Kkni Untuk Meningkatkan Kompetensi Mahasiswa</i> Bajoka Naingolan, Manihar Situmorang, Ramlan Silaban | 219-229 |
| <i>Pengembangan Sumber Belajar Inovatif Berbasis Proyek Untuk Materi Isolasi Senyawa Organik Bahan Alam Dalam Menghadapi Era New Normal</i> Dessy Novianty Pakpahan, Marham Sitorus, dan Saronom Silaban | 230-235 |
| <i>Implementasi Asesmen Kompetensi Minimum Materi Asam Basa Konteks Sainifik</i> Izza Nabilatunnisa, Wiwi Siswaningsih, Nahadi | 236-244 |
| <i>Pengaruh Model Pembelajaran Problem Based Learning Menggunakan Macromedia Flash Terhadap Aktivitas Dan Hasil Belajar Ikatan Kimia</i> Siswa Cessya Novianindra Br Tarigan dan Gulmah Sugiharti | 245-251 |
| <i>Validitas Tes Diagnostik untuk Materi Pembelajaran Ikatan Kimia SMA</i> Winda Fourthelina Sianturi dan Zainuddin Muchtar | 252-256 |
| <i>Pengembangan Lembar Kerja Peserta Didik (LKPD) Berbasis Discovery Learning Pada Materi Asam Basa</i> Eratania Surbakti, Makharany Dalimunthe | 257-267 |
| <i>Analisis Kebutuhan Bahan Ajar Kimia Koloid Berbasis Online untuk Siswa SMA</i> Elssya Dwi Imanuella Manullang, Ramlan Silaban | 268-273 |
| <i>Pengaruh Penggunaan Media Webblog Terhadap Motivasi Dan Hasil Belajar Siswa Sma Pada Materi Ikatan Kimia</i> Febiola Rohani Marpaung dan Murniaty Simorangkir | 274-279 |
| <i>Validitas dan Reliabilitas Instrumen Penelitian Tes dan Non Tes Pada Materi Laju Reaksi</i> Freshya Sionitha Sembiring dan Haqqi Annazili Nasution | 280-284 |
| <i>Analisis Kebutuhan Media Pembelajaran Kimia Berbasis Komputer Untuk Mengajarkan Laju Reaksi Pada Siswa SMA</i> | |

| | |
|---|---------|
| Julianse Lydia Nababan dan Ramlan Silaban | 285-290 |
| <i>Pengembangan Media Pembelajaran Berbasis Android pada Materi Ikatan Kimia</i> | |
| Sabrina Khairani Hasibuan dan Destria Roza | 291-297 |
| <i>Pengembangan Bahan Ajar Kontekstual Berbasis Evaluasi HOTS Untuk Meningkatkan Hasil Belajar dan Nilai Karakter Siswa Pada Materi Asam Basa di SMA N 4 Pematang Siantar</i> | |
| Frida Claudia Sianipar dan Marham Sitorus | 298-308 |
| <i>Pengembangan E-Modul Pembelajaran Pada Pembuatanbriket Limbah Kulit Durian Dan Sabut Kelapa Pada Materi Senyawa Hidrokarbon Kelas XI</i> | |
| Dessy Agustina, Julia Maulina, Hasrita Lubis | 309-315 |
| <i>Pengembangan Bahan Ajar Berbasis Problem Based Learning (PBL) Pada Materi Ikatan Ion Dan Kovalen Untuk Kelas X</i> | |
| Ayu Inggrias Tuty dan Jamalum Purba | 316-322 |
| <i>Pengembangan Bahan Ajar Berbasis Project Based Learning (PjBL) Pada Materi Ikatan Ion Dan Kovalen Untuk Kelas X</i> | |
| Else R Sigalingging dan Jamalum Purba | 323-327 |
| <i>Pengembangan Media Pembelajaran Terintegrasi Scrabble Berbasis Android Pada Materi Senyawa Hidrokarbon Kelas XI</i> | |
| Elmirawanti Sihite dan Nora Susanti | 328-334 |
| <i>Implementasi Animasi Flash Terhadap Aktivitasdan Hasil Belajar Siswa Pada Materi Ikatan Kimia</i> | |
| Elsima Nainggolan dan Nora Susanti | 335-341 |
| <i>Analisis Respon Siswa Terhadap Aplikasi Daringsebagai Sumber Dan Media Belajar Alternatif Pada Mata Pelajaran Kimia Selama Pandemi</i> | |
| Jumasari Siregar dan Nurfajrian | 342-345 |
| <i>Pengembangan Media Pembelajaran Berbasis Android dengan menggunakan Software Construct 2 pada Materi Laju Reaksi</i> | |
| Natalin Pertiwi Siahaan dan Nora Susanti | 346-350 |
| <u>Makalah Poster</u> | |
| <i>Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (Hksa) Dan Docking Molekuler Senyawaturunan 2-Aminokalkon Sebagai Obat Antikanker Tulang</i> | |
| Tico Guinnessha S, Rissah Maulina, SyaSya Azzaythounah, Lidia Mutia Sari, DestriaRoza | 351-356 |
| <i>Doking Molekular Potensi Antikanker Leukemia Protein P388 Dengan Senyawa Turunan Chalcone</i> | |
| Nadia Givani Br Hotang dan Destria Roza | 357-361 |
| <i>Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan 4- Aminochalcone sebagai Antikanker Radikal Hidroksil</i> | |
| Indah Fitri dan Destria Roza | 362-368 |
| <i>Studi Molecular Docking Senyawa Antosianidin Dari Ekstrak Buah Jamblang (Syzygium cumini) Sebagai Senyawa Anti-Tumor Secara In Silico</i> | |
| Dea Gracella Siagian dan Destria Roza | 369-374 |
| <i>Docking Molekular Potensi Antikanker Payudara Protein3ert Dengan Senyawa Turunan Kuinin</i> | |
| Ruth Yohana Saragih, Nurul Hidayah, Destria Roza | 375-381 |
| <i>Studi In Silico Potensi Senyawa Asam Askorbat Sebagai Anti Kanker Hati</i> | |
| Nia Veronika dan Destria Roza | 382-386 |

| | |
|--|---------|
| <i>Analisis In-Silico Senyawa Aktif Flavonoid Tanaman Kelor Sebagai Inhibitor Main Protease SARS-CoV-2 Melalui Metode Molecular Docking</i> Saud Salomo dan Destria Roza | 387-395 |
| <i>Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan 4- Aminochalcone Sebagai Anti Leukemia Murine (L1210)</i> Wirna Dewi Zebua dan Destria Roza | 396-403 |
| <i>Docking Senyawa Kalkon Terhadap Reseptor Estrogen-Q (1QKM) Sebagai Antikanker Payudara</i> Cindy Agnesia dan Destria Roza | 404-407 |
| <i>Uji Docking Senyawa Alkaloid Quinolizidine dan Analognya Sebagai Inhibitor Reseptor Estrogen pada Kanker Payudara</i> Indira Aviza, Anggita Leontin Sitorus, Destria Roza | 408-415 |
| <i>Uji Docking Senyawa Alkaloid Piperidine dan Analognya Sebagai Inhibitor Reseptor Estrogen pada Kanker Payudara</i> Anggita Leontin Sitorus, Indira Aviza, Destria Roza | 416-423 |
| <i>Studi Docking Molekuler Senyawa Turunan Kurkuminoid Pada Kunyit (Curcuma longa Linn.) Sebagai Inhibitor Protein Kinase Mek1 Sel Kanker Otak Dengan Autodock</i> Vina Nadia Agnes Cantika Nadeak dan Destria Roza | 424-430 |
| <i>Docking Ligan Anti Kanker Prostat dengan Ligan Pembanding Senyawa Turunan Asam Galat Menggunakan Autodock 4.2 dan Discovery Studio</i> Astri Devi Br Pakpahan dan Destria Roza | 431-439 |
| <i>Docking Molekuler Potensi Senyawa 2,6-Dimethylocta-3,5,7-Trien-2-Ol Terhadap Senyawa 4110 Anti Kanker Paru</i> Yohansen Wahyudi dan Destria Roza | 440-444 |
| <i>Docking Molekuler Potensi Antikanker Payudara Protein Iyc4 Dari Senyawa Turunan Kuersetin</i> Depi Inasari Sipahutar dan Destria Roza | 445-449 |





Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Senyawa Turunan 4-Aminochalcone terhadap Human T-Leukimia (CEM)

Hasri tri maya saragih¹, Destria Roza¹

Jurusan Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Negeri Medan
Jl. Willem Iskandar Psr V, Medan

*Email korespondensi: hasrisaragih2000@gmail.com

Abstrak

Telah dilakukan analisis hubungan kuantitatif struktur aktivitas (HKSA) terhadap 10 senyawa turunan 4-Aminochalcone berdasarkan metode regresi linier. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mendapatkan model persamaan HKSA yang baik dan dapat digunakan untuk memprediksi aktivitas antikanker senyawa turunan methoxy- aminochalcones lain. Terhadap setiap senyawa dilakukan optimasi geometri dengan metode semi-empirical basis set CNDO (Complete Neglect Of Differential Overlap), kemudian dihitung nilai deskriptornya menggunakan software Hyperchem 8.0.8. Data aktivitas antikanker IC50 diperoleh dari literatur dan dinyatakan sebagai Log 1/IC50. Data perhitungan deskriptor diolah menggunakan SPSS 16.0, diperoleh persamaan HKSA sebagai berikut : $\text{Log } 1/\text{IC}50 = -64,881 (-0,005 \cdot \text{Isolated Atomic Energy}) - (0,432 \cdot \text{Binding Energi}) - (0,122 \cdot \text{Electronic Energi}) - (0,149 \cdot \text{Core-core Interaction})$, dengan $n = 10$; $R = 0,701$; $Q^2 = 0,99842$. Dari persamaan HKSA didapatkan prediksi senyawa yang berpotensi sebagai antikanker, yaitu senyawa 4- Amino-7-Acetone-12,14,15-tribromine-chalcone dengan nilai Log 1/IC-50 sebesar 12,826475.

Kata kunci: leukimia, HKSA, SPSS 16.0, turunan methoxy-aminochalcones.

Abstract

Analysis of the quantitative activity structure relationship (HKSA) on 10 4-Aminochalcone derivatives has been carried out based on the linear regression method. The purpose of this study was to obtain a good HKSA equation model that can be used to predict the anticancer activity of other methoxy-aminochalcones derivatives. For each compound, geometry optimization was carried out using the semi-empirical basis set CNDO (Complete Neglect Of Differential Overlap) method, then the descriptor value was calculated using Hyperchem 8.0.8 software. IC50 anticancer activity data were obtained from the literature and expressed as Log 1/IC50. The descriptor calculation data was processed using SPSS 16.0, the HKSA equation was obtained as follows: $\text{Log } 1/\text{IC}50 = -64,881 (-0.005 \cdot \text{Isolated Atomic Energy}) - (0.432 \cdot \text{Binding Energy}) - (0.122 \cdot \text{Electronic Energy}) - (0.149 \cdot \text{Core-core interaction})$, with $n = 10$; $R = 0.701$; $Q^2 = 0.99842$. From the HKSA equation, predictions of compounds that have the potential as anticancer were obtained, namely the compound 4-Amino-7-Acetone-12,14,15-tribromine-chalcone with a Log 1/IC-50 value of 12.826475.

Keywords: leukemia, HKSA, SPSS 16.0, methoxy-aminochalcones derivatives.

1. Pendahuluan

Data statistika World Health Organization menunjukkan bahwa kanker sudah menjadi penyakit utama yang menyebabkan kematian di dunia. Tercatat ada sebanyak 12,7 juta kasus kanker dan 7,6 juta jiwa diantaranya berakhir pada kematian, atau sekitar 13% dari angka kematian total pada tahun 2008. Di tahun 2011 tercatat 3,72 juta kasus kanker di kawasan Asia, dimana mayoritas terjadi di kawasan Asia Timur (WHO 2011). Tingginya angka kematian yang disebabkan oleh kanker menyebabkan penelitian mengenai senyawa-senyawa antikanker semakin berkembang [1].

Kalkon merupakan metabolit sekunder dari golongan flavonoid yang banyak ditemukan di alam terutama pada tumbuh-tumbuhan. Kalkon dikenal sebagai perantara sintesis berbagai macam senyawa heterosiklik. Berdasarkan beberapa penelitian yang telah dilakukan, kalkon telah dilaporkan memiliki berbagai macam aktivitas biologis antara lain sebagai antimikroba, antimalaria, antiinflamasi, analgesik, antiplatelet, antivirus, antileishmania, antioksidan, penghambatan pelepasan mediator kimia, penghambat leukotrien B4, penghambatan tirosinase, dan penghambatan aktivitas aldose reductase [2].

Leukemia menjadi penyebab utama kematian karena kanker pada anak di Amerika. Di Indonesia data dari Pediatric Cancer Units (PCU) empat rumah sakit selama tiga periode (Maret 2006-July 2010) terdapat 541 pasien leukemia akut, diantaranya ALL sebesar 381 (77%). Kanker leukemia saat ini masih menduduki peringkat tertinggi pada anak, dari waktu ke waktu jumlah penderita leukemia pada anak juga terus meningkat. Penanganan kanker pada anak di Indonesia masih lambat, maka tidak heran jika banyak anak penderita kanker



yang ditangani secara medis sudah memasuki stadium lanjut. Acute lymphoblastic leukemia (ALL) merupakan salah satu jenis leukemia (kanker sel darah putih) yang pada umumnya terjadi pada anak-anak. Angka kejadian tertinggi sekitar 80 % penderita berumur 1-4 tahun dan keganasannya berkembang dengan cepat, jika tidak segera dirawat bisa berakibat fatal terhadap kondisi penderita dalam beberapa bulan. Deteksi dini sangat penting untuk langkah pengobatan yang lebih efektif [3].

Kanker merupakan salah satu penyebab kematian tertinggi di seluruh dunia. Dari data Globocan menyebutkan di tahun 2018 terdapat 18,1 juta kasus baru dengan angka kematian sebesar 9,6 juta kematian, dimana 1 dari 5 laki-laki dan 1 dari 6 perempuan di dunia mengalami kejadian kanker. Data tersebut juga menyatakan 1 dari 8 laki-laki dan 1 dari 11 perempuan, meninggal karena kanker. Angka kejadian penyakit kanker di Indonesia (136.2/100.000 penduduk) berada pada urutan 8 di Asia Tenggara, sedangkan di Asia urutan ke 23. Sedangkan angka kejadian untuk perempuan yang tertinggi adalah kanker payudara yaitu sebesar 42,1 per 100.000 penduduk dengan rata-rata kematian 17 per 100.000 penduduk yang diikuti kanker leher rahim sebesar 23,4 per 100.000 penduduk dengan rata-rata kematian 13,9 per 100.000 penduduk. Jumlah kalkan sangat terbatas di alam dengan variasi strukturnya relatif sedikit menjadikan sintesis merupakan metode untuk mendapatkan jumlah kalkan yang lebih banyak dengan variasi struktur yang lebih beragam. Sintesis kalkan melalui kondensasi Claisen Schmidt menggunakan metode iradiasi microwave telah menarik perhatian bagi peneliti karena terjadinya peningkatan hasil reaksi, peningkatan kemurnian hasil reaksi, kemudahan kerja dan kondisi reaksi ramah lingkungan dibandingkan dengan metode konvensional [4].

2. Metode Penelitian

2.1. Struktur Molekul dan Optimasi Geometri

Struktur dilakukan dengan program HyperChem 8.0 for Windows Molecular Modeling System. Pembuatan struktur meliputi pembuatan kerangka dasar, dan penambahan atom hidrogen. Optimasi dilakukan dengan menyesuaikan sudut-sudut ikatannya. Struktur dioptimasi dengan metode semi-empirical basis set CNDO (Complete Neglect Of Differential Overlap) hingga diperoleh struktur stabil. Masing-masing molekul yang sudah dioptimasi lalu disimpan dalam ekstensi mol.

2.2. Perhitungan Prediktor

Seri senyawa yang sudah dioptimasi lalu dihitung prediktor yang dianggap mampu mewakili aktivitasnya. Perhitungan prediktor dilakukan dengan menggunakan software Molecular Operating Environment (MOE 2007.09). Seri senyawa yang sudah dioptimasi dipindahkan ke data notepad dengan perintah optimasi energi

lalu start-log setelah itu tunggu hingga stop-log. Prediktor yang dipilih merupakan prediktor yang umum digunakan dalam penelitian HKSA, yaitu diperkirakan memiliki pengaruh besar terhadap senyawa antara lain energi total, energi elektronik, energi panas pembentukan, energi HOMO, energi LUMO, momen dipol total, luas permukaan hidrofobik, koefisien partisi, globularitas, dan solubilitas.

2.3. Analisis Statistik

Seri senyawa dan prediktor yang sudah didapat dalam ekstensi.txt (Notepad) melalui software HYPERCHEM 8.0 lalu dibuka dengan Microsoft Office Excel dan disimpan dalam bentuk tabel. Setelah itu dilakukan analisis regresi linier menggunakan software SPSS Statistic 16.0. Nilai IC50 sebagai variabel bebas (sumbu Y) dipasangkan dengan nilai kombinasi beberapa prediktor sebagai variabel terikat (sumbu X). Nilai prediktor yang dipasangkan merupakan kombinasi dari dua, tiga, dan empat pasangan prediktor.

Dari model yang didapatkan dipilih model prediktor terbaik yang memenuhi persyaratan statistik dengan parameter r , F_{hitung}/F_{tabel} , dan q^2 . Model prediktor yang memenuhi persyaratan memiliki nilai $r \geq 0.8$, $F_{hitung}/F_{tabel} \geq 1$, dan $q^2 \geq 0.5$ yang menyatakan bahwa bahwa hipotesis nol (H_0) ditolak, sedangkan hipotesis alternatif (H_A) diterima pada aras 0,05 atau tingkat kepercayaan 95% (Scheffler 1987).

2.4. Validasi Model Statistik

Validasi model statistik dilakukan untuk mendapatkan persamaan HKSA (hubungan kuantitatif struktur aktivitas) yang dapat diterima. Validasi dilakukan dengan metode regenerasi linier. Setelah dilakukan validasi, lalu dilakukan kembali analisis statistik untuk menghitung nilai r , F_{hitung}/F_{tabel} , dan q^2 .

2.5. Desain Senyawa Baru

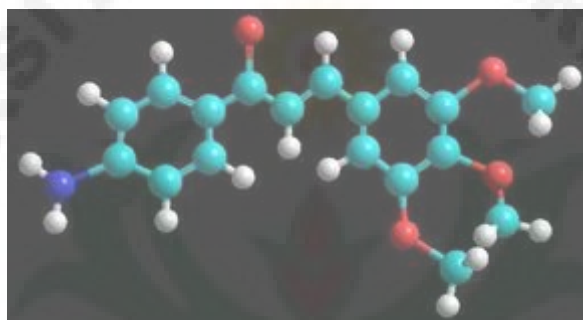
Desain senyawa baru dilakukan dengan menambahkan substituen tertentu pada senyawa induk yang dipilih. Senyawa induk dipilih dari senyawa yang tidak tereliminasi yang memiliki aktivitas paling tinggi atau IC50 paling rendah yaitu senyawa 3i dengan IC50 2,3. Pemilihan substituen dilakukan dengan pendekatan skema Topliss yaitu dengan menambahkan substituen -Cl, -NH₂, -CH₃, -OCH₃, -C₄H₉, -N(CH₃)₂, -NO₂, -F, dan -CF₃ pada berbagai posisi (Song 2008). Pada desain senyawa modifikasi 3i dipakai substituen Br (Bromin) Setelah itu dihitung IC50 senyawa baru dengan menggunakan persamaan HKSA terbaik yang sudah didapat dan dipilih senyawa baru yang memiliki nilai IC50 lebih rendah dari senyawa induk.

2.6. SPSS 16.0

Senyawa baru yang terpilih dipelajari interaksinya dengan reseptor menggunakan software SPSS 16.0. Parameter yang diamati dengan software SPSS 16.0 adalah regresi linier yang baik serta mendapatkan deskriptor yang memenuhi syarat, sehingga membentuk persamaan HKSA.

3. Hasil Dan Pembahasan

Perancangan struktur senyawa 4-Amino kalkon berbasis T-Human Leukimia dilakukan dengan menggunakan program hyperchem 8.0®. Struktur dibuat dan dioptimasi, optimasi struktur yang digunakan menggunakan metode semi-empirical. Metode ini digunakan karena memiliki tingkat keakuratan yang lebih tinggi dibandingkan dengan metode lainnya. Metode CNDO bergantung dari kemampuan komputer yang digunakan, karena metode ini menggunakan waktu yang cukup lama untuk melakukan optimasi struktur, media simpan dan memori komputer. Setelah memilih metode yang digunakan pemilihan basis juga merupakan bagian yang penting dari keberhasilan doking. Setelah basis sudah diset proses optimasi akan berlangsung. Lamanya waktu optimasi tergantung dari struktur yang dirancang. Struktur senyawa hasil optimasi dapat dilihat pada Gambar 1.



Gambar 1 Struktur senyawa hasil optimasi senyawa 4-Amino-7-Acetone-12,14,15-tribromine chalcone

Berdasarkan Tabel 1 menunjukkan bahwa senyawa turunan 4-Amino kalkon berbasis T- Human Leukimia yang tersubstitusi OH, dan OCH₃ memiliki aktivitas yang cukup baik. Dimana y_i adalah aktivitas senyawa i , \bar{y}_i adalah aktivitas eksperimen rata-rata, \hat{y}_i adalah aktivitas prediksi dari senyawa i , yang dikomputasi melalui persamaan regresi baru setiap penghilangan satu nilai data. perhitungan nilai prediktor untuk senyawa analog yang sudah dioptimasi dilakukan dengan menggunakan software SPSS 16.0. Total digunakan 4 prediktor dengan jumlah 10 senyawa. Hasil perhitungan nilai-nilai prediktor setiap senyawa ini lalu dianalisis statistik dengan cara regresi linear untuk melihat hubungan antara beberapa variabel bebas dengan satu variabel terikat.

Tabel 1. Hasil Analisis HKSA dengan Microsoft Excel

| y | $y-y$ | $(y-y)^2$ | y_{rata} | $y-y_{rata}$ | $(y-y_{rata})^2$ |
|-------------|----------------|-------------|------------|--------------|------------------|
| -4576277957 | 4.576.392.569 | 2.09434E+19 | 37.632 | 76.980 | 5925985788 |
| -1079.86478 | 1.081 | 1167834.94 | 37.632 | -57.631 | 1416107263 |
| -1193.49622 | 137.365 | 18869279552 | 37.632 | 98.540 | 9710131600 |
| -1771.62613 | 1.773 | 3141780.868 | 37.632 | -37.631 | 1416101131 |
| 0.46542 | 125.527 | 15756910884 | 37.632 | 87.895 | 7725531025 |
| -1179.10302 | 1.179 | 1390283.932 | 37.632 | -37.632 | 1416167424 |
| -1302.32054 | 1.303 | 1698008.13 | 37.632 | -37.631 | 1416110635 |
| 5626525817 | -5.626.525.816 | 3.16555E+19 | 37.632 | -37.631 | 1416094538 |
| -1209.95912 | 1.210 | 1464876.536 | 37.632 | -37.632 | 1416140200 |
| -1112.79964 | 1.114 | 1240520.167 | 37.632 | -37.631 | 1416093157 |
| | | 5.25989E+19 | | | 33274462660 |

Analisis dilakukan terhadap variabel terikat yang berupa IC₅₀ (sumbu Y) dengan variabel bebas yang berupa nilai setiap prediktor (sumbu X). Parameter yang didapat dalam regresi linear menggunakan program SPSS adalah nilai r dan F_{hitung}/F_{tabel} . Persyaratan statistik dipenuhi bila nilai $r \geq 0,8$ dan nilai F mengindikasikan tingkat signifikansi lebih baik dari 95% (Qubinyi 1993). Nilai r dan F_{hitung} didapat dari hasil analisis program SPSS sedangkan nilai F_{tabel} didapat menggunakan rumus:

$$F(1-P) = FINV(P, dfq, dfv)$$

P adalah aras kepercayaan, dfq adalah $k-1$ dan dfv adalah $n-k$, k adalah jumlah variabel dan n adalah jumlah senyawa. Setelah didapat persamaan yang paling baik lalu dihitung. kuadrat koefisien validasi silang (q^2) yang merupakan indikator performansidan stabilitas model terhadap keseluruhan senyawa yang dianalisis. Untuk model yang dapat dipercaya, kuadrat koefisien validasi silang q^2 sebaiknya $\geq 0,5$, dicari dengan rumus.

$$Q^2 = 0,99842$$

Coefficients^a

| Model | | Unstandardized Coefficients | | Standardized Coefficients | t | Sig. |
|-------|------------|-----------------------------|------------|---------------------------|--------|------|
| | | B | Std. Error | Beta | | |
| 1 | (Constant) | -64.881 | 107.491 | | -.604 | .572 |
| | e_binding | -.432 | .350 | -.620 | -1.236 | .271 |
| | e_iatomic | -.005 | .011 | -.349 | -.480 | .651 |
| | e_elec | -122.280 | 205.203 | -14.756 | -.596 | .577 |
| | core_int | -149.592 | 235.857 | -15.428 | -.634 | .554 |

Dari ketiga parameter r , Fhitung/Ftabel, dan q^2 dipilih model prediktor terbaik yaitu yang paling mendekati persyaratan yang merupakan kombinasi dari empat prediktor, yaitu E_Binding, E_Iatomic, E_Elec, dan Core_Inter. Persamaan HKSA terbaik ditentukan berdasarkan data yang ada, dengan parameter yang sudah memenuhi persyaratan statistik. Persamaan HKSA yang didapat adalah sebagai berikut:

$$R = 0,701$$

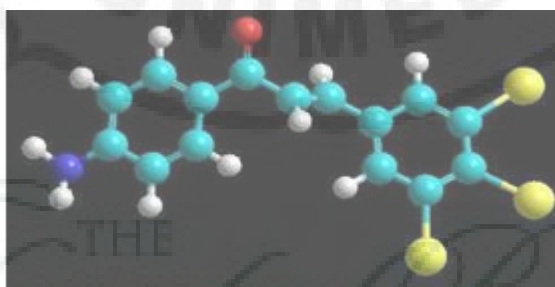
$$\text{LogIC50} = -64,881(-0,005 * e_{iatomic}) (0,432 * e_{binding}) - (0,122 * e_{elec}) - (0,149 * core_{int})$$

$$\text{LogIC50} = -64,881 (-0,005 * 105) - (0,432 * 102) - (0,122 * 530) - (0,149 * 415)$$

$$\text{LogIC50} = -64,881 (0,525) - (-44,064) - (-64,66) - (61,835)$$

$$\text{LogIC50} = 12,826475$$

Desain senyawa baru dilakukan dengan cara penambahan substituen pada senyawa agar diharapkan mampu menghasilkan senyawa baru yang memiliki aktivitas yang lebih baik. Cara substitusi sendiri dapat dilakukan dengan beberapa cara antara lain dengan penambahan substituen, pemanjangan rantai, simplifikasi struktur, ekspansi cincin, dan rigiditas. Dalam desain senyawa baru ini dilakukan metode substitusi dengan penambahan substituen, substituen dipilih dengan menggunakan pendekatan skema Topliss untuk substitusi aromatik dan kombinasi dua substituen X dan Y pada posisi yang berbeda-beda. Digunakan sembilan macam substituen yaitu -Cl, -NH₂, -CH₃, -OCH₃, -C₄H₉, -N(CH₃)₂, -NO₂, -F, dan -CF₃.



Gambar 24-Amino-7-Acetoxy-12,14,15 tribromine-chalcone

Pemilihan tempat substitusi tersebut didasari pada hasil penelitian mengenai hubungan struktur dan aktivitas eksperimen, dimana penambahan gugus pendonor atau penarik elektron pada posisi tersebut memiliki pengaruh yang cukup signifikan pada aktivitas dan efek elektronik senyawa. Dari persamaan HKSA senyawa baru yang dimodifikasi dengan substituen bromin didapatkan prediksi senyawa yang berpotensi sebagai antikanker, yaitu senyawa 4-Amino-7-Acetoxy-12,14,15 tribromine-chalcone dengan nilai Log 1/IC₅₀ sebesar 12,826475.

4. Kesimpulan

Persamaan HKSA terbaik yang menggambarkan hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas senyawa turunan 4-Amino kalcon adalah $\text{LogIC50} = -64,881 (-0,005 * e_{iatomic}) (0,432 * e_{binding}) - (0,122 * e_{elec}) - (0,149 * core_{int})$ $\text{LogIC50} = 12,826475$, Dari 10 senyawa yang berhasil didesain ditemukan 1 senyawa yang memiliki aktivitas lebih tinggi daripada senyawa induk yang ditandai dengan nilai IC₅₀ yang lebih kecil, yaitu senyawa gambar 1 atau 3i.



Daftar Pustaka

- [1] Fadhilah,Q.,dan Daryono,H,T.2012.Hubungan Kuantitatif Struktur dan Inhibitor Pembentukan Mikrotubulus Acta Pharmaceutica Indonesia XXXVII (3).
- [2] Fathullah,A,A.,Dkk.2018.Interaksi beberapa senyawa kalkon berbasis parasetamol terhadap protein enzim yang berperan dalam mekanisme antibakteri.Jurnal Kartika Kimia 1(1) Hal 17-20.
- [3] Suratin,M,D.,Rahmadwati, dan Aziz,M.2015. Identifikasi Sel Acute Lymphoblastic Leukemia (ALL) pada Citra Peripheral Blood Smear Berdasarkan Morfologi Sel Darah Putih. elektronik Jurnal Arus Elektro Indonesia.1(3).
- [4] Dona,R.,Dkk.2019. Studi In Silico, Sintesis, dan Uji Sitotoksik Senyawa P-Metoksi Kalkon Terhadap Sel Kanker Payudara MCF-7. Jurnal Sains Farmasi dan Klinis.6(3). Hal 243-249.

