



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 kehadiran 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 Guinnessa 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 4l10 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 Irnasari Sipahutar dan Destria Roza	445-449



HKSA Senyawa Turunan Metoksi-Aminokalkon Terhadap Murine Leukemia (L1210) Menggunakan Metode Semiempiris CNDO Dan Regresi Linear

Elfrida Siregar¹ Destria Roza¹

¹Jurusan Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Negeri Medan
Jl. Willem Iskandar Psr. V, Medan

Email : siregarelfrida802@gmail.com

Abstrak

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui hubungan kuantitatif struktur-aktivitas (HKSA) dari enam senyawa turunan 4-aminokalkon baik sebelum ditambah ligan maupun sesudah ditambah ligan C₃H₅ (alil) terhadap murine leukemia dan perolehan LogIC₅₀ prediksi yang dimiliki senyawa. Penelitian dilakukan melalui software HyperChem dengan menggunakan metode semiempiris CNDO dan software SPSS dengan metode Regresi Linear. IC₅₀ eksperimen senyawa turunan 4-aminokalkon terhadap murine leukemia diperoleh dari review penelitian oleh molecules journal. Hasil analisis memberikan model persamaan terbaik sebagai berikut: $\text{Log IC}_{50} \text{ prediksi} = 7.970 + (0.521 * \text{HOMO}) - (0.027 * \text{MR}) + (0.011 * \text{SA})$ sehingga nilai Log IC₅₀ prediksi salah satu senyawa metoksi-aminokalkon sebesar 1.15281227 lebih kecil dari Log IC₅₀ eksperimen sebesar 1.342423. Nilai Log IC₅₀ salah satu senyawa 4-aminokalkon modifikasi dengan penambahan ligan C₃H₅ (alil) sebesar 0.8563959.

Kata Kunci: HKSA, turunan Metoksi-Aminokalkon, semiempiris CNDO, log IC₅₀ prediksi

Abstract

The purpose of this study was to determine the quantitative structure-activity relationship (HKSA) of six 4-aminochalcone derivatives both before and after ligand addition plus the C₃H₅ (alil) ligand against murine leukemia and the predictive LogIC₅₀ gain possessed compound. The research was conducted through HyperChem software using a semi-empirical method CNDO and IC₅₀ experimental compound derivatives 4-aminochalcone against murine leukemia was obtained from a research review by the molecules journal. Results analysis gives the best equation model as follows: $\text{Log IC}_{50} \text{ prediction} = 7.970 + (0.521 * \text{HOMO}) - (0.027 * \text{MR}) + (0.011 * \text{SA})$ so that the Log IC₅₀ value predicts one compound methoxy-aminochalcone of 1.15281227 is smaller than the experimental IC₅₀ log of 1.342423. Mark Log IC₅₀ one of the modified 4-aminochalcone compounds with the addition of a C₃H₅ (alyl) ligand of 0.8563959.

Keywords: HKSA, 4-aminochalcone derivatives, semi-empirical CNDO, Log IC₅₀ prediction

6. Pendahuluan

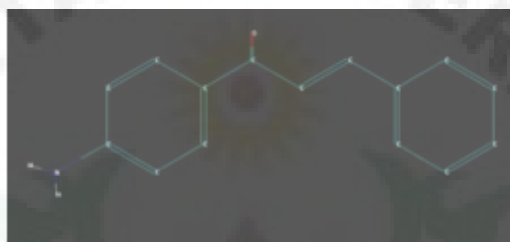
Percobaan untuk mendapatkan estimasi toksisitas dan aktivitas obat pada manusia membutuhkan beberapa perlakuan. Pada pemodelan suatu obat, obat melewati perlakuan yang panjang sehingga membutuhkan waktu cukup lama dan biaya yang cukup besar yang harus dikeluarkan. Hal tersebut merupakan suatu kelemahan dalam mendapatkan estimasi toksisitas dan aktivitas obat pada manusia. Kelemahan tersebut dapat di komputasi yang sangat sesuai dengan kemajuan teknologi. Salah satunya seperti untuk studi Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (HKSA) atau Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR). Hal ini sinergis dengan perkembangan penemuan obat baru yang semakin lama diharapkan semakin efektif dan efisien. Metode ini sangat cocok untuk memprediksikan senyawa obat seperti senyawa turunan metoksi-aminokalkon untuk penyakit-mematikan yaitu penyakit murine leukemia [1].

Studi HKSA ini meliputi studi penemuan senyawa baru, studi kimia anorganik dan studi kimia organik. Dalam mempelajari aktivitas suatu obat dengan metode HKSA (Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas) atau Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) melibatkan beberapa parameter. Sehingga, penelitian ini mengkaji dan menganalisis hubungan kuantitatif antara sifat fisika dan sifat kimia senyawa turunan metoksi-aminokalkon terhadap aktifitas biologis murine leukemia yang dinyatakan dalam logIC₅₀. IC₅₀ (Inhibition Concentration 50%) yaitu konsentrasi yang dapat merendam 50% radikal bebas DPPH. Percobaan ini menggunakan tiga buah parameter, yaitu parameter hidrofobik berupa koefisien partisi (log p), parameter sterik berupa surface area grid (luas permukaan), refraktifitas (refractivity) dan massa molekul, dan parameter

elektronik berupa teori orbital molekul seperti HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital), energi orbital molekul LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), Energi total (E_{tot}), energy binding ($E_{Binding}$) dan energi bebas (free energies) selain berdasarkan teori orbital molekul ada juga berdasarkan semi teoritis seperti energy elektronik dan berdasarkan percobaan seperti dipole moment yang dihitung dengan perangkat lunak HyperChem 8.0 menggunakan metode semiempiris CNDO. Metode ini dipilih karena dirancang untuk memproduksi panas pembentukan dan struktur dari sejumlah besar molekul organik. Selanjutnya, parameter-parameter tersebut dianalisis hubungannya secara statistik dengan aktivitas biologis yang diambil dari literatur menggunakan software IBM SPSS Statistics 20 [2].

7. Metode Penelitian

Bahan yang digunakan berupa senyawa turunan metoksi-aminokalkon yang berjumlah 6 senyawa, diperoleh dari review penelitian oleh "molecules journal". Data senyawa dengan aktivitas biologi terdapat pada tabel 1 dan untuk struktur induk terdapat pada Gambar 1.



Gambar 1. 4-aminokalkon

Tabel 1. Nilai IC50 metoksi-aminokalkon (3a,3c,3d,3e,3g,3i) terhadap leukemia murine(L1210)

Compound	L1210 ()
3a	18±5
3c	22± 15
3d	13±8
3e	34± 12
3g	6.0± 4.2
3i	7.8± 0.1

Perangkat keras

Komputer dengan prosesor Intel Celeron R dengan kapasitas 2 GB RAM Memory dan 500GB HDD.

Perangkat lunak

Perangkat lunak yang digunakan adalah software Hyperchem 8.0 untuk melakukan pemodelan atau penggambaran senyawa turunan metoksi-aminokalkon, optimasi geometri semiempiris CNDO, perhitungan log P, energi HOMO, energi LUMO, luas permukaan (surface area grid), refraktifitas (refractivity), massa molekul, dipole moment, energy total, energy binding (energy ikatan), energy elektronik, energi bebas (free energies) dan software Microsoft Office Excel 2010 untuk perhitungan data, dan IBM SPSS Statistics 20 untuk analisis statistik.

7.1 Pemodelan Struktur Senyawa Turunan 4-Aminokalkon

Sejumlah enam (6) senyawa turunan 4-aminokalkon (Tabel 1) digambar dan dibentuk secara 2D dengan cara mengklik icon "draw" untuk membuat gambar 2D tersebut, lalu untuk memunculkan tabel unsur seperti tabel SPU klik icon "build" kemudian pilih "Default Element". Setelah selesai membuat model struktur senyawa turunan 4-aminokalkon dalam bentuk 2D, kemudian beralih untuk membuat model struktur senyawa turunan 4-aminokalkon dalam bentuk 3D. Dalam membuat bentuk 3D dari struktur senyawa turunan 4-aminokalkon, maka klik "Display", pilih "Rendering" kemudian pada bagian option rendering ubah dari sticks menjadi ball and cylinders. Pemodelan struktur senyawa turunan 4-aminokalkon baik dalam bentuk 2D ataupun 3D dilakukan pada software HyperChem.

7.2 Pengoptimasian Struktur Senyawa Turunan 4-Aminokalkon dengan Metode Semiempiris CNDO

Senyawa turunan 4-aminokalkon setelah melalui pemodelan struktur senyawa turunan tersebut kemudian di geometry optimization (pengoptimasian) menggunakan metode semiempiris CNDO pada software



HyperChem untuk mendapatkan struktur yang paling stabil dengan tingkat energi terendah. Untuk melakukan pengoptimasian, klik icon “compute” lalu klik “Geometry Optimazation”.

7.3 Perhitungan Parameter Hidrofobik, Parameter Sterik, Parameter elektronik (Variabel independent)

Setelah melakukan optimasi geometri, dilakukan perhitungan parameter hidrofobik, sterik dan elektronik (variabel independen). Data perhitungan parameter elektronik diperoleh dari icon compute lalu pilih single point dengan output data dikumpulkan pada file rekaman (file.log). Untuk memulai rekaman dilakukan start log pada icon file dan untuk mengakhiri rekaman dilakukan stop log pada icon file. Data yang terdapat dalam file rekaman meliputi Energi total (E_{tot}), energy binding ($E_{Binding}$) dan energy elektronik (E_{Ele}). Data perhitungan parameter hidrofobik dan parameter sterik yang meliputi log P, surface area grid (luas permukaan), refraktifitas (refractivity) dan massa molekul dapat dilihat dengan mengklik icon compute, lalu pilih opsi “QSAR properties” dari program Hyperchem. Pada parameter elektronik, selain data yang sudah disebutkan diatas terdapat juga data lain seperti HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) dan LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) yang diperoleh dengan menggunakan Compute-Orbitals-pilih HOMO/LUMO-Nilai Energy muncul, serta data lain parameter elektronik seperti energi bebas (free energies) dan dipole moment diperoleh dengan menggunakan Compute-Properties Molecules.

7.4 Perhitungan Log IC50 Eksperimen (Variabel dependen)

Setelah mendapatkan data-data variabel independen, terdapat juga data variabel dependen. Data dependen yang digunakan seperti IC50 diperoleh dari jurnal review penelitian oleh molecules journal. Kemudian untuk memperoleh data Log IC50 dari senyawa turunan 4-aminokalkon, dilakukan perhitungan Log IC50 pada MS Excel berdasarkan IC50 metoksi-aminokalkon terhadap leukimia murine (L1210).

7.5 Penentuan Deskriptor

Dalam menentukan deskriptor, tahap awal yang dilakukan yaitu memindahkan salinan data-data parameter hidrofobik, elektronik, sterik, IC50 dan log IC50 yang ada pada software excel ke software SPSS. Setelah data-data tersebut di salin ke software IBM SPSS statistics 20, dilakukan tahap analyze yang mana pada tahap analyze digunakan metode Regression Linear - Backward. Pada pilihan atau opsi data independen, isi atau masukan semua data parameter hidrofobik, elektronik dan sterik. Sedangkan. Pada pilihan atau opsi data dependen, isi atau masukan data Log IC50 eksperimen. Dalam memilih deskriptor yang baik dilihat dari nilai $R \geq 0.7$ atau salah satu pilihan memiliki prediktors yang paling sedikit.

7.6 Kombinasi Deskriptor

Setelah memperoleh deskriptor, dilanjutkan dengan mengkombinasikan deskriptor yang sudah ditentukan. Hasil dari kombinasi deskriptor yang memiliki nilai R paling memenuhi syarat (≥ 0.7) menjadi deskriptor yang baik untuk membuat persamaan Log IC50 prediksi yang mana untuk melihat nilai R dari masing-masing kombinasi deskriptor tersebut yaitu dari Analyze - Regression - Linear - Enter, lihat tabel model summary.

7.7 Validasi Persamaan Log IC50 Prediksi

Dari ke 6 data uji ini dilakukan perhitungan nilai Log IC50 prediksi dari persamaan regresi terbaik yang telah diperoleh. Persamaan Log IC50 Prediksi yang terbentuk diperoleh dari Analyze Regression - Linear - lihat tabel coefficient (coefficient constant, SA, LUMO, MR). Data coefficient SA, LUMO dan MR, masing-masing dikalikan dengan nilai SA, LUMO dan MR itu sendiri.

7.8 Pembuangan Data Outlier

Data outlier yang dibuang merupakan data senyawa yang menyimpang dari garis regresi linear yang menyebabkan nilai R dibawah 0.7(kurang baik). Pembuangan data outlier ini terlebih dahulu membuat grafik regresi linear di *software excel*. Kemudian pilih data yang jika dibuang menyebabkan kenaikan nilai R.

7.9 Perhitungan q2

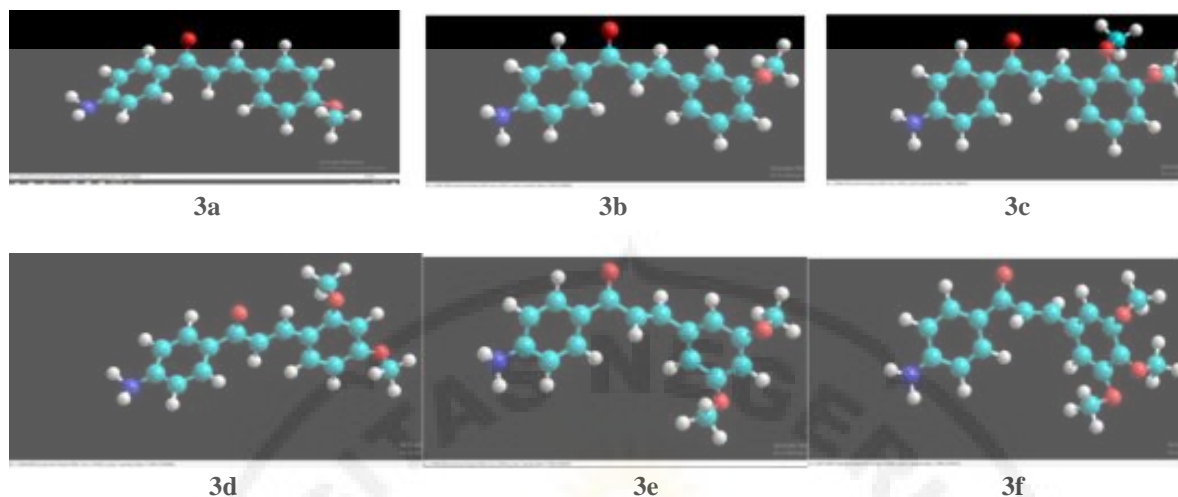
Perhitungan q2 dilakukan pada software excel. Nilai q2 diusahakan bernilai positif dan nilai q2 yang memenuhi syarat yaitu $q2 \geq 0.5$

7.10 Modifikasi Senyawa Turunan 4 -Aminokalkon

Modifikasi senyawa turunan 4-Aminokalkon yaitu dengan menggantikan substituen metoksi menjadi substituen ligan C_3H_5 (alil). Perolehan data sama saja seperti tahapan-tahapan di atas. Kemudian untuk mendapat nilai Log IC50 senyawa modifikasi ini diperoleh berdasarkan persamaan yang sama pada perolehan Log IC50 prediksi.

8. Hasil dan Pembahasan

Senyawa turunan 4-aminokalkon setelah melalui pemodelan struktur senyawa turunan tersebut dalam bentuk 3D, kemudian di geometry optimazation (pengoptimasian) menggunakan metode semiempiris CNDO pada software HyperChem untuk mendapatkan struktur yang paling stabil dengan tingkat energi terendah. Gambar 2 merupakan hasil geometri optimasi dari 6 senyawa turunan 4-aminokalkon (senyawa metoksi-aminokalkon).



Gambar 2. Gambar Senyawa Metoksi-Aminokalkon Dalam Bentuk 3D Dan Telah Optimasi Geometry

Hasil perhitungan metode semiempiris CNDO menggunakan program HyperChem diperoleh data berupa Log P, surface area grid (luas permukaan), refraktifitas (refractivity), massa molekul, HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital), LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), Energi total (E_tot), energy binding (E_Binding), energi bebas (free energies), energi elektronik (E_Elek) dan dipole Moment sebagaimana disajikan pada gambar 3. Data-data tersebut merupakan variabel independen pada software IBM SPSS statistics 20. Selain data independen, terdapat data dependen seperti IC50 dan Log IC50. Data-data yang diperoleh dari metode semiempiris CNDO tersebut di salin dalam Microsoft Excel yang mana nantinya data tersebut dipindahkan ke software IBM SPSS statistics 20.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
1	senyawa	E_Totol	E_Binding	E_Ele	SA	LOG P	Refractivity	Polarizability	Free Energies	Dipole Moment	LUMO	HOMO	HF	MR	IC50	LOG IC50
2	3a	-108922.9678	-11368.4874	-501414.2025	494.71	0.38	84.99	29.32	-108922.9678	3.94494	1.569649	-9.759068	-7620.599401	253.3	18	1.255273
3	3c	-108921.1875	-11366.70706	-504699.4799	499.79	0.38	84.99	29.32	-108921.1875	3.48474	2.245112	-10.51013	-7618.819063	253.3	22	1.342423
4	3d	-125959.8649	-12388.41422	-621697.2524	511.65	-0.62	91.36	31.79	-125959.8665	4.09621	1.761734	-9.902461	-8305.873222	283.33	13	1.113943
5	3e	-125976.336	-12404.88535	-613294.2105	531.83	-0.62	91.36	31.79	-125976.336	3.75423	1.896595	-9.288177	-8322.944348	283.33	34	1.531479
6	3g	-125970.6507	-12399.20003	-611464.6766	536.91	-0.62	91.36	31.79	-125970.6507	4.42218	2.274842	-10.07387	-8316.659032	283.33	6	0.778151
7	3i	-143005.8057	-15417.38471	-734989.6262	554.19	-1.61	97.73	34.26	-143005.8057	2.65418	2.309409	-9.006695	-9000.190708	313.35	7.8	0.8920946
8																

Gambar 3. Data-data variabel Independen

Tabel 2. Nilai IC50 metoksi-aminokalkon terhadap leukimia murine dan Nilai Log IC50 Eksprimen

IC50	LOG IC50
18.0	1.255273
22.0	1.342423
13.0	1.113943
34.0	1.531479
6.0	.778151
7.8	.892095

Beberapa data yang ditampilkan pada gambar 3 merupakan hasil data perolehan HKSA seperti SA(surface area grid), Log P, Refractivity, Polarizability dan MR. Surface Area Grid merupakan perkiraan luas permukaan yang dilihat dari domain. Log P (logaritma koefisien partisi n-oktanol/air) menyatakan semakin besar log P maka lebih toksik, hal ini dikarenakan apabila Log P semakin besar maka akan mempertinggi kelarutannya dalam lemak, dengan semakin tingginya kelarutan pada lemak akan lebih mudah diabsorpsi pada saluran pencernaan untuk masuk ke sistemik dan masuk pada sel. Refractivity menyatakan bahwa semakin kecil nilainya semakin toksik, hal ini disebabkan semakin kecil nilai refractivity maka semakin mudah senyawa tersebut masuk kedalam sel. Polarizability merupakan kemudahan terganggunya distribusi elektron dalam suatu molekul. Mass menyatakan berat atau bobot dari suatu molekul/senyawa. IC50 merupakan konsentrasi yang dapat merendam 50% radikal bebas DPPH. Semakin kecil nilai IC50 maka aktivitas antioksidannya lebih besar.

Hasil dari perlakuan menggunakan metode regresi linear pada software IBM SPSS statistics 20 yaitu memberikan deskriptor seperti yang ditampilkan pada tabel 3 yang nantinya dikombinasi untuk menghasilkan nilai $R \geq 0.7$ dan hasil kombinasi yang memiliki nilai $R \geq 0.7$, descriptor tersebutlah yang digunakan dalam validasi persamaan HKSA untuk memperoleh Log IC50 prediksi. Hasil deskriptor kombinasi yang memiliki nilai $R \geq 0.7$ adalah HOMO, MR DAN SA dengan nilai $R = 0.758$ ditunjukkan pada tabel 4 dan tabel 5.

Tabel 3. Deskriptor Dari Metode Regresi Linear

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error Of The Estimate
1	1.000 ^a	1.000	-	-

- a. Predictors (constant), MR, LUMO, MomenDipole, SA, HUMO Tabel 4 Hasil Analisis Regresi Linear Pada Model Summary

Tabel 4. Hasil Analisis Regresi Linear Pada Model Summary

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error Of The Estimate
1	0.758 ^a	0.574	-0.065	0.291754342

- a. Predictors (constant), SA, LUMO, MR

Tabel 5. Hasil Kombinasi Deskriptor

KOMBINASI	R
MR, MomenDipole, LUMO	0.694
MR,MomenDipole,SA	0.592
MomenDipole,LUMO,SA	0.626
SA, MR, LUMO	0.604
MR,Momendipole,HOMO	0.752
HOMO, SA, Momendipole	0.601
HOMO, LUMO, SA	0.572
HOMO, MR, SA	0.758

Dari deskriptor HOMO, SA dan MR maka dihasilkan suatu validasi persamaan(persamaan HKSA) yaitu $\text{LogIC}_{50} \text{ Prediksi} = 7.970 + (0.521 * \text{HOMO}) - (0.027 * \text{MR}) + (0.011 * \text{SA})$. $\text{LogIC}_{50} \text{ Prediksi}$ tersebut diperoleh dengan melihat tabel coefficient (tabel 6) yang mana pada tabel tersebut terdapat data coefficient masing- masing deskriptor sehingga membentuk rumus: $\text{LogIC}_{50} = \text{constant} + (\text{coeff SA} * \text{Nilai SA}) + (\text{coeff LUMO} * \text{Nilai LUMO}) + (\text{coeff MR} * \text{Nilai MR})$. Nilai $\text{LogIC}_{50} \text{ Prediksi}$ setiap senyawa dapat dilihat pada tabel 7. Selain dari dihasilkannya persamaan $\text{LogIC}_{50} \text{ prediksi}$ tersebut, terdapat juga nilai F hitung (nilai F pada tabel Anova) 0.899. F tabel = 19.16429. Nilai dari F hitung/ F tabel = 0.04691. Persamaan HKSA LogIC_{50} , Fhitung dan Ftabel di peroleh dari IBM SPSS statistics 20 dengan metode Regresi Linear dan dibantu oleh Microsoft Excel.

Tabel 6. Coefficients Deskriptor HOMO, MR dan SA

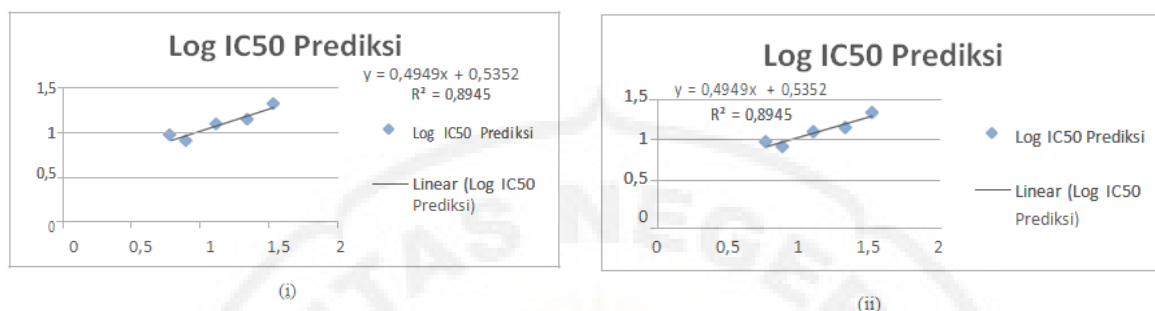
Model	Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	T	Sig.
	B	Std. Error	Beta		
1(Constant)	7.970	5.564		1.432	0.288
HOMO	0.521	0.441	1.040	1.181	0.359
MR	-0.027	0.025	-2.127	-1.076	0.394
SA	0.011	0.019	0.885	0.568	0.627

Dependent Variable: LogIC_{50} Tabel 7 Nilai Log IC_{50} prediksi

Tabel 7. Nilai Log IC_{50} Prediksi

Senyawa	Log IC_{50} Eksperimen	Log IC_{50} Prediksi
3a	1.255273	1.488235572
3c	1.342423	1.15281227
3d	1.113943	1.101657819
3e	1.531479	1.331079783
3g	0.778151	0.97761373
3i	0.892094603	0.913151905

Hasil grafik dari hubungan Log IC50 Eksperimen dengan Log IC50 prediksi (gambar 4) menunjukkan bahwa terdapat data senyawa yang menyimpang dari garis regresi linear yang menyebabkan nilai R dibawah 0.7(kurang baik) dan data senyawa yang menyimpang tersebut adalah data senyawa(data outlier) "a". Sehingga dilakukan pembuangan data outlier "a".



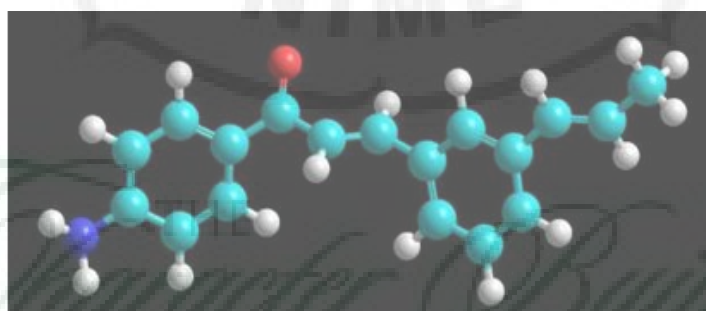
Gambar 4. (i) merupakan hasil regresi linear yang belum dilakukan pembuangan data outlier, (ii) merupakan hasil regresi linear yang sudah dilakukan pembuangan data outlier.

Dengan adanya pembuangan data outlier, maka turunan senyawa 4-aminokalkon dalam menentukan q2 menjadi lima senyawa. Data q2 diperoleh dari perhitungan dengan menggunakan Microsoft Excel yang mana nilai q2 yang diperoleh sebesar 0.83456 dan nilai q2 tersebut sudah memenuhi syarat karena nilai q2 yang diperoleh sudah diatas 0.5 atau mendekati 1.

Senyawa modifikasi pada pengujian ini yaitu dengan menggantikan substituen metoksi menjadi substituen ligan C₃H₅(alil). Perlakuan dalam menghasilkan data parameter hidrofobik,sterik dan elektronik(variabel independen) serta data IC50 ataupun Log IC50 pada penambahan substituen C₃H₅ terhadap senyawa aminokalkon sama dengan perlakuan pada penambahan substituen metoksi terhadap senyawa aminokalkon. Nilai Log IC50 senyawa modifikasi pada penambahan substituen C₃H₅ ditunjukkan pada gambar 5 yaitu 0.8563959 dan gambar struktur senyawa modifikasi tersebut ditunjukkan pada gambar 6.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
senyawa	E_Total	E_Binding	E_Ele	SA	LOG P	Refractivity	Polarizability	Free Energies	Dipole Moment	LUMO	HOMO	HF	MR	Log IC50
3c	-107176.216	-12429.60009	-515300.1315	544.47	2.05	93.21	32.16	-107176.217	4.62883	2.29473	-11.5021	-8295.287085	263.34	0.8563959

Gambar 5. Hasil LogIC50 Senyawa Modifikasi pada penambahan substituen C₃H₅



Gambar 6. Pemodelan Struktur Senyawa Modifikasi Pada Penambahan Substituen C₃H₅

9. Kesimpulan

Dari hasil penelitian didapat beberapa model persamaan hubungan kuantitatif struktur dan analisis toksisitas senyawa turunan 4-Aminokalkon dengan metode semiempiris CNDO (Software HyperChem) dan Regresi Linear (IBM SPSS statistics 20) dan dipilih persamaan HKSA terbaik yang memberikan pendekatan deskripsi dan prediksi yang baik adalah sebagai berikut : $\text{Log IC50 Prediksi} = 7.970 + (0.521 \cdot \text{HOMO}) - (0.027 \cdot \text{MR}) + (0.011 \cdot \text{SA})$, $R = 0.758$, $r^2 = 0.8945$, $q_2 = 0.83456$. Dari model persamaan tersebut, diketahui tiga buah deskriptor yang digunakan yaitu HOMO, MR dan SA. Hasil perolehan nilai LogIC50 senyawa modifikasi pada penambahan substituen C₃H₅ dengan menggunakan persamaan yang telah diperoleh menunjukkan nilai LogIC50 senyawa modifikasi pada penambahan substituen C₃H₅ lebih kecil dari Log IC50 eksperimen ataupun Log IC50 prediksi yaitu 0.8563959 (aktivitas antioksidan lebih besar).



Daftar Pustaka

- [1] Amin, S. 2014. Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas Antibakteri Turunan Benzimidazol Menggunakan Metode PM3. *Jurnal Kesehatan Bakti Tunas Husada*. 12:1. 254-261
- [2] Arba,M., Ruslin., Nursan., Maulidiyah., Tjahjono,D. 2018. Hubungan Kuantitatif StrukturAktivitas (HKSA) dan Penambatan Molekul Senyawa Turunan Benzamida sebagai Inhibitor Alosterik Mitogen Enhanced Kinase(MEK). *Jurnal Kimia VALENSI*. 4:1.42
- [3] Utomo,B,S., Sanubari,F.,Utami,B.,Nurhayati,N. (2017). Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Dan AktivitasAnalgesik Senyawa Turunan Meperidin Menggunakan Metode Semiempiris AM1. *Jurnal Kimia Dan Pendidikan Kimia*. 2(3). 158-168.
- [4] Male, Y. T., Sutapa, W., Pusung,Y. (2018). Prediksi Potensi Antikanker Senyawa Turunan Xanthon Menggunakan Hubungan KuantitatifStruktur Dan Aktivitas (Hksa). *Chem*. 11(1). 1-6

