



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 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 Assessment 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 (IQKM) 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





Studi Docking Molekuler Senyawa Turunan Kurkuminoid Pada Kunyit (*Curcuma longa* Linn.) Sebagai Inhibitor Protein Kinase MEK1 Sel Kanker Otak Dengan Autodock Vina

Nadia Agnes Cantika Nadeak^{1*}, Destria Roza²

^{1,2}Jurusan Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Negeri Medan
Jl. Willem Iskandar Psr. V, Medan

*Email korespondensi: nadianadeak15@gmail.com

Abstrak

Secara *in silico* penelitian senyawa turunan kurkuminoid yang berasal dari kunyit (*Curcuma longa* Linn.) telah menunjukkan berbagai aktivitas farmakologi. Penelitian ini merupakan penelitian eksperimental dengan menggunakan alat bantu komputer yaitu perangkat lunak AutoDock Tools-1.5.6 dengan tujuan untuk mendapatkan senyawa turunan kurkuminoid sebagai kandidat obat antikanker otak yang terbaik melalui penambatan molekuler. Penambatan phosphoaminophosphonic acid-adenylate ester ($C_{10}H_{17}N_6O_{12}P_3$) sebagai ligan alami dan kurkumin ($C_{21}H_{20}O_6$) sebagai ligan pembanding dilakukan terhadap reseptor MEK 1 kode PDB 3ORN menggunakan metode penambatan molekul dengan AutoDock Tools-1.5.6 dan divisualisasi dengan Discovery Studio Visualizer. Hasil penambatan ligan alami diperoleh memiliki nilai energi bebas ikatan (Δ) -8.27 kkal/mol, konstanta inhibisi 0.86614 M dengan residu asam amino yang terikat GLY80, LYS97, VAL211, SER212, HIS188, GLY210, MET143, ARG189, VAL127, ILE141, CYS207 dan ligan pembanding diperoleh memiliki nilai energi bebas ikatan (Δ) -7.36 kkal/mol, konstanta inhibisi 4.03 M dengan residu asam amino yang terikat GLY80, LYS97, VAL211, SER212, HIS188, GLY210, MET143, ARG189, VAL127, ILE141, CYS207. Kesimpulan penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa kurkuminoid pada kunyit belum berpotensi untuk dijadikan kandidat obat antikanker otak dalam menggantikan ligan alami.

Kata kunci: Kanker otak, kurkumin, 3ORN, *in silico*, MEK1

Abstract

In silico studies of curcuminoid derivatives derived from turmeric (Curcuma longa Linn.) have shown various pharmacological activities. This research is an experimental study using a computer tool, namely AutoDock Tools-

1.5.6 software with the aim of obtaining curcuminoid derivative compounds as the best candidate for brain anticancer drugs through molecular tethering. The binding of phosphoaminophosphonic acid-adenylate ester ($C_{10}H_{17}N_6O_{12}P_3$) as a natural ligand and curcumin ($C_{21}H_{20}O_6$) as a comparison ligand was performed on the MEK 1 receptor coded PDB 3ORN using the molecular anchoring method with AutoDock Tools-1.5.6 and visualized with the Discovery Studio Visualizer. The results of the binding of natural ligands obtained have a bond free energy value (Δ) -8.27 kcal/mol, an inhibition constant of 0.86614 M with amino acid residues bound to GLY80, LYS97, VAL211, SER212, HIS188, GLY210, MET143, ARG189, VAL127, ILE141, CYS207 and the comparison ligands obtained have energy values free binding (Δ) -7.36 kcal/mol, an inhibition constant of 4.03

M with amino acid residues bound to GLY80, LYS97, VAL211, SER212, HIS188, GLY210, MET143, ARG189, VAL127, ILE141, CYS207. The conclusion of this study shows that the curcuminoid compounds in turmeric have no potential as candidates for brain anticancer drugs to replace natural ligands.

Keywords: Brain cancer, curcumin, 3ORN, *in silico*, MEK1

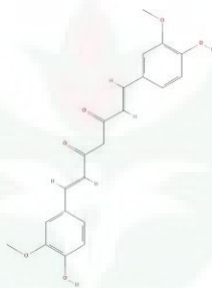
1. Pendahuluan

Otak merupakan pusat kendali seluruh fungsi organ tubuh manusia. Jika otak sehat, maka akan mendorong kesehatan tubuh serta menunjang kesehatan mental. Sebaliknya, apabila otak terganggu, maka kesehatan tubuh dan mental bisa ikut terganggu. Susunan saraf pusat meliputi otak dan medulla spinalis. Otak merupakan organ manusia yang terpenting yang mengatur pikiran, ingatan, emosi, sensoris, kemampuan gerak, penglihatan, pernafasan, suhu dan semua proses di dalam tubuh [1].

Tumor otak adalah pertumbuhan sel-sel yang abnormal didalam otak. Tumor otak primer apabila pertumbuhan sel abnormal terjadi pertama kali di dalam otak bukan merupakan metasase dari tumor di organ lainnya. Tumor otak mempunyai sifat yang berlainan dibandingkan tumor di tempat lain. Walaupun secara histologis jinak, mungkin akan bersifat ganas karena letaknya berdekatan atau di sekitar struktur vital dan dalam rongga tertutup yang sukar dicapai. Belum diketahui secara pasti apa yang menyebabkan seseorang menderita tumor otak primer. Diperkirakan bahwa tumor otak primer mulai muncul ketika sel normal mengalami kesalahan atau mutasi DNA. Mutasi inilah yang membuat sel-sel tumbuh dan berkembang biak dengan tingkat yang lebih cepat, serta tetap hidup ketika sel-sel sehat sudah mati. Akibatnya terjadi penumpukan sel-sel abnormal dan membentuk tumor. Tumor otak primer lebih jarang terjadi dibandingkan tumor otak sekunder.

Usaha-usaha pencegahan atau pengobatan kanker menjadi semakin penting mengingat tingkat kejadiannya yang cukup tinggi. Beberapa usaha pengobatan kanker telah dilakukan secara intensif meliputi pengobatan fisik, dengan pembedahan maupun dengan pengobatan dengan senyawa kimia (kemoterapi). Sampai saat ini obat kanker yang benar-benar efektif belum ditemukan. Hal ini karena rendahnya selektifitas obat-obat kanker yang digunakan maupun karena belum diketahuinya dengan jelas proses karsinogenesis itu sendiri.

Kurkumin (Gambar 1.) merupakan bagian terbesar pigmen kuning yang terdapat dalam rimpang kunyit (*Curcuma longa* Linn.) yang memiliki berbagai aktivitas biologis seperti antioksidan, antiinflamasi, dan antineoplastik. Oleh penduduk Asia, utamanya India dan Indonesia zat warna kuning dari kurkuma tersebut sering digunakan sebagai bahan tambahan makanan, bumbu atau obat-obatan dan tidak menimbulkan efek toksik yang merugikan [2].



Gambar 1. Struktur Kurkumin (1E,6E)-1,7-Bis(4-Hydroxy-3-Methoxyphenyl)Hepta-1,6-Diene-3,5-Dione

Tawaran yang menarik akhir-akhir ini adalah pemanfaatan komputer sebagai alat bantu dalam penemuan obat. Kemampuan komputasi yang meningkat eksponensial merupakan peluang untuk mengembangkan simulasi dan kalkulasi dalam merancang obat. Komputer menawarkan metode *in silico* sebagai komplemen metode *in vitro* dan *in vivo* yang lazim digunakan dalam proses penemuan obat [3].

2. Metode Penelitian

2.1 Download Protein Target Untuk Penambatan Molekul

Struktur protein target (makromolekul/reseptor) diperoleh dari Protein Data Bank melalui website <https://www.rcsb.org/>. Diketik senyawa MEK (*Mitogen Enhanced Kinase*), lalu pilih molekul 3ORN dengan organism *Homo sapiens*, resolusi 2.80 Å, dan metode *X-Ray Diffraction*. Kemudian unduh dengan format .pdb. Tentukan inhibitor (ligan alaminya) dimana dapat dilihat dari *small molecules*, lalu pilih phosphoaminophosphonic acid-adenylate ester.

2.2 Validasi Metode Docking

Langkah pertama memisahkan reseptor dan ligan alaminya dengan membuang molekul H₂O. Ligan 1 dibuang dalam pemisahan reseptor dan ligan 2, 3 dibuang dalam pemisahan ligannya menggunakan program Discovery studio. Selanjutnya preparasi reseptor dilakukan dengan menambahkan molekul H₂ menggunakan program AutoDock Tools-1.5.6. Pada preparasi ligan, ligan di *detect root* dan di *choose torsion*. Memasuki persiapan autogrid, tekan *center on ligand* dan atur dimensi x, y, z sehingga ligan masuk dalam kotak dan tidak mengenai garis luar. Untuk memastikan metode penambatan molekul yang digunakan telah memenuhi persyaratan, parameter yang digunakan dengan cara melihat nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*), jika < 2 Å maka dinyatakan valid dan reseptor tersebut bisa digunakan untuk penambatan molekul.

2.3 Analisis Hasil Docking

Pertama docking senyawa uji dibuka dari dock.dlg, cari nilai dimensi x, y, z dan koordinat sentralnya. Lalu, analisis hasil docking dilihat dari tumpang tindih ligan. Kemudian dari *conformation load*-nya dilihat dari nilai *binding energy* dan konstanta inhibisi yang terbentuk. *Binding energy* digunakan untuk menunjukkan kekuatan ikatan antara senyawa dengan reseptor. Semakin rendah nilai *binding energy* maka ikatan yang terbentuk semakin

kuat dan stabil. Konstanta inhibisi digunakan untuk mengindikasikan seberapa kuat suatu inhibitor. Semakin rendah nilai KI nya semakin kuat inhibitorynya.

2.4 Visualisasi Hasil Docking Autodock Dengan Discovery Studio Visualizer

Hasil docking molekuler diketahui dari ikatan hidrogen yang terbentuk dimana digunakan untuk menganalisis mekanisme interaksi yang terbentuk. Selain itu parameter lain yang dianalisa adalah residu asam amino.

2.5 Persiapan Ligan Pemandang

Ligan pemandang yang digunakan merupakan senyawa turunan kurkuminoid pada kunyit yakni kurkumin. Diperoleh dari website <http://PubChem.ncbi.nlm.nih.gov>, diunduh berupa struktur 3D nya dengan format .sdf dan dikonversikan hasilnya dalam format .pdb dengan menggunakan Pymol.

2.6 Validasi Metode Docking Ligan Pemandang

Pada tahap preparasi makromolekul ditambahkan molekul H_2 . Kemudian preparasi ligan dilakukan dengan mendetect root ligan dan lakukan *choose torsion*. Persiapan autogrid dilakukan sama halnya dengan ligan alami dimana nilai dimensi x, y, z, dan center grid box disamakan. Untuk kasus penyamaan dimensi dan center grid box, ligan tidak harus masuk dalam kotak. Dalam memastikan metode penambatan molekul yang digunakan telah memenuhi persyaratan, parameter yang digunakan dengan cara melihat nilai RMSD (*Root Mean Square Deviation*), jika $< 2 \text{ \AA}$ maka dinyatakan valid.

2.7 Analisis Hasil Docking Ligan Pemandang

Pertama docking ligan pemandang dibuka dari dock.dlg, cari nilai dimensi x, y, z dan koordinat sentralnya. Lalu, analisis hasil docking dilihat dari tumpang tindih ligan. Kemudian dari *conformation load*-nya dilihat dari nilai *binding energy* dan konstanta inhibisi yang terbentuk. *Binding energy* digunakan untuk menunjukkan kekuatan ikatan antara senyawa dengan reseptor. Semakin rendah nilai *binding energy* maka ikatan yang terbentuk semakin kuat dan stabil. Konstanta inhibisi digunakan untuk mengindikasikan seberapa kuat suatu inhibitor. Semakin rendah nilai KI nya semakin kuat inhibitorynya.

2.8 Visualisasi Hasil Docking Autodock Dengan Discovery Studio Visualizer

Hasil docking molekuler diketahui dari ikatan hidrogen yang terbentuk dimana digunakan untuk menganalisis mekanisme interaksi yang terbentuk dan dicari kesamaan interaksi molekuler ligan alami dengan ligan pemandang. Selain itu parameter lain yang dianalisa adalah residu asam aminonya.

3. Hasil Dan Pembahasan

3.1 Persiapan Reseptor

Proses penambatan molekul diawali dengan menyiapkan reseptor yang akan digunakan. Pada tahap penyiapan reseptor struktur makromolekul yang digunakan diunduh dari PDB (Protein Data Bank) dengan website <http://www.rcsb.org/>. Pada penelitian ini menggunakan reseptor MEK 1. Identitas makromolekul tersebut yaitu 3ORN dengan resolusi 2.80 \AA menggunakan metode kristalografi X-ray. Makromolekul ini dipilih untuk melihat kemampuan penghambatan senyawa uji terhadap MEK1 bermutasi yang menjadi penyebab kanker otak.



Gambar 2. Reseptor MEK 1 (Kode PDB 3ORN)

Struktur kristal tersebut digunakan untuk membuat file makromolekul dan ligan pdb yang terpisah menggunakan perangkat lunak Discovery Studio 2016. Pada umumnya struktur protein pada PDB mengandung molekul pelarut berupa air dan residu lainnya, sehingga diperlukan penghilangan molekul air agar tidak mengganggu pada saat stimulasi docking dilakukan dan untuk memastikan bahwa yang benar-benar berinteraksi adalah ligan dan reseptor. Selain itu juga perlu ditambahkan hidrogen untuk menyesuaikan suasana docking agar mendekati pada pH 7. Setelah reseptor selesai dipreparasi, reseptor tersebut disimpan dengan format pdbqt.

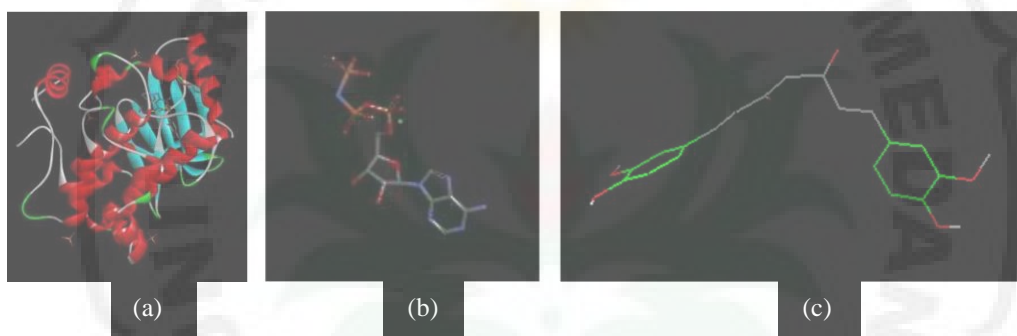
Selanjutnya persiapan ligan alami dilakukan menggunakan Discovery Studio. Kemudian dilanjutkan proses penambatan molekul menggunakan program Autodock Tools.

3.2 Persiapan Ligan Pemanding

Ligan yang digunakan adalah bahan kimia aktif dari kunyit yang dicari menggunakan website <http://PubChem.ncbi.nlm.nih.gov>. Diambil bahan kimia aktif kurkumin (PubChem CID: 969516) yang mana bahan tersebut terkandung dalam jumlah besar pada kunyit. PubChem adalah sebuah database yang mengandung berbagai informasi terkait suatu senyawa kimia [4]. Struktur yang diambil adalah konformasi 3D dalam format SDF dan diubah menjadi format PDB menggunakan Pymol. Pymol adalah sebuah software yang dapat digunakan untuk menggambarkan grafik molekuler [5].

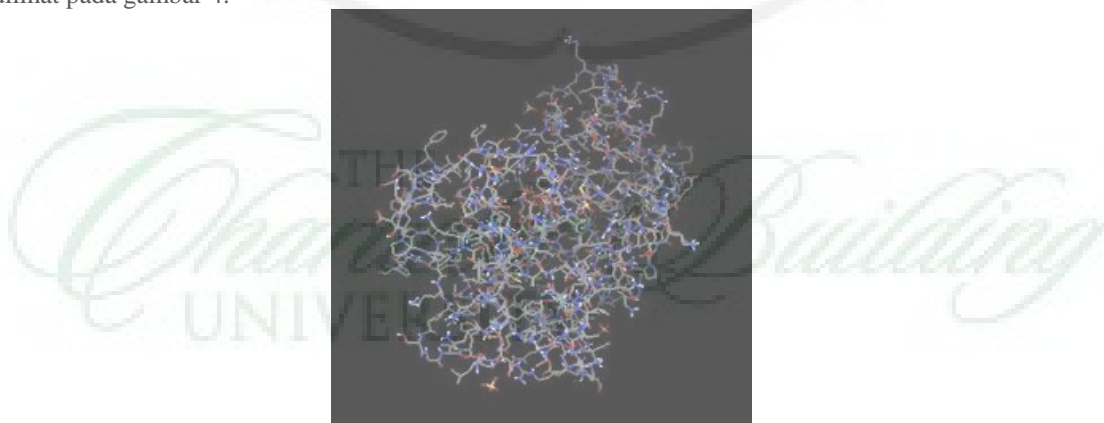
3.3 Validasi Metode Docking

Protein MEK1 dipreparasi dengan memisahkan protein dengan ligan alaminya sehingga diperoleh struktur protein tanpa ligan alami dan struktur ligan alami yang terpisah seperti Gambar 2. Pemisahan protein dengan ligan alami bertujuan untuk menyediakan pocket sebagai tempat senyawa uji berikatan dengan protein MEK1. Rantai protein yang dipilih dalam pengujian ini adalah rantai A yang berikatan dengan ligan alami phosphoaminophosphonic acid-adenylate ester, yang berfungsi sebagai inhibitor MEK1.



Gambar 3. Struktur 3 Dimensi Protein MEK1 Tanpa Ligan (a) Ligan Alami Protein MEK1 (b) Ligan Pemanding (c)

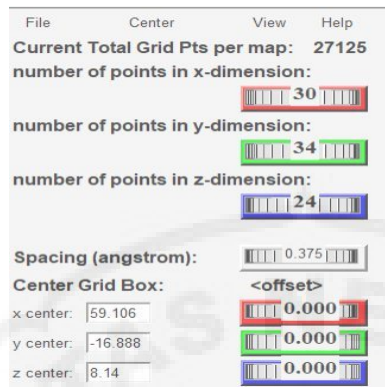
Parameter validasi docking dilihat dari nilai RMSDnya. RMSD merupakan jarak penyimpangan dari posisi ikatan ligan alami dengan protein setelah didocking terhadap posisi ikatan ligan alami yang sebenarnya. Nilai RMSD ini disebut pula dengan jarak ikatan. RMSD ligan alami yang diperoleh dalam penelitian adalah 1.56 dan ligan pemanding 54.48 Å yang berarti bahwa metode docking molekuler ligan alami yang digunakan telah tervalidasi sedangkan ligan alami belum memenuhi syarat. Visualisasi interaksi validasi metode docking molekuler dapat dilihat pada gambar 4.



Gambar 4. Visualisasi Interaksi Protein MEK1 dengan Ligan Alaminya

3.4 Analisis Hasil Docking

Proses docking dilakukan menggunakan gridbox dan dapat dilihat pada gambar 5. Gridbox berfungsi untuk menentukan daerah reseptor yang akan ditambatkan berdasarkan koordinat x, y, dan z dari ligan alami dan disamakan dengan ligan pemanding dengan tujuan untuk mengetahui konformasi energi ligan terendah. Hasil dari penambatan molekul pada penelitian ini yang akan dianalisis meliputi *binding energy* dan nilai konstanta inhibisi dilihat pada gambar 6.



Gambar 5. Pengaturan Gridbox Ligan Alami dan Ligan Pembanding

Rank	SubRank	docked energy
Rank: 1_1		
Binding Energy:		-8.27
kl :		866.14nM
Intermolecular Energy :		-10.06
Internal Energy :		-1.76
Torsional Energy :		1.79
Unbound Extended Energy:		-1.76
Cluster RMS:		0.0
Ref RMS:		1.56
select from 50 dockings: (double click to update coords)		
ligan-2 input		
ligan-2_1_1		-8.27
ligan-2_1_2		-8.22
ligan-2_1_3		-8.09
ligan-2_1_4		-7.98
ligan-2_1_5		-7.74
ligan-2_1_6		-7.38
ligan-2_1_7		-7.36

Rank	SubRank	docked energy
Rank: 1_1		
Binding Energy:		-7.36
kl :		4.03uM
Intermolecular Energy :		-10.34
Internal Energy :		-2.34
Torsional Energy :		2.98
Unbound Extended Energy:		-2.34
Cluster RMS:		0.0
Ref RMS:		54.48
select from 50 dockings: (double click to update coords)		
LIGAND-2 input		
LIGAND-2_1_1		-7.36
LIGAND-2_1_2		-6.13
LIGAND-2_1_3		-5.38
LIGAND-2_1_4		-4.99
LIGAND-2_1_5		-4.36
LIGAND-2_1_6		-3.2
LIGAND-2_2_1		-5.78

Gambar 6. Conformation-Load Ligan Alami (a) Conformation-Load Ligan Pembanding (b)
3.5 Visualisasi Hasil Docking Autodock Dengan Discovery Studio Visualizer

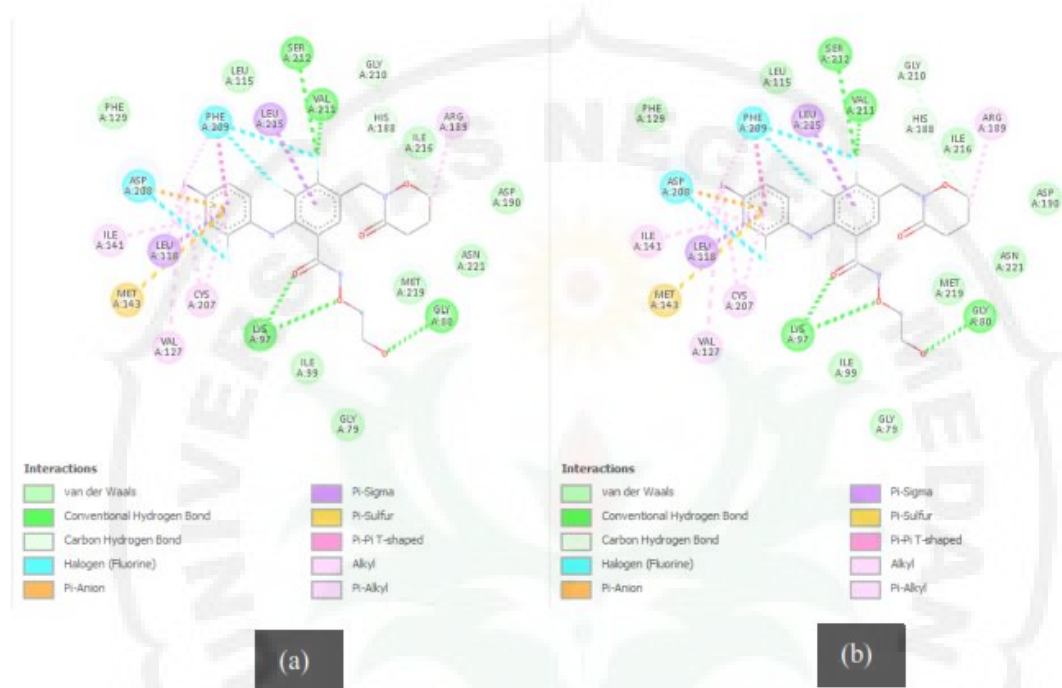
Visualisasi dilakukan untuk melihat ikatan hidrogen yang terbentuk dan residu asam amino yang berikatan. Visualisasi interaksi ini dilakukan menggunakan program Discovery Studio 2016.

Tabel 1. Interaksi Intermolekuler Ligan Alami dan Ligan Pembanding

Warna	Kategori	Tipe	Jumlah Interaksi	
			Phosphoaminophosphonic acid-adenylate ester & Kurkumin	Residu asamamino
	H Bond	Conventional Hydrogen Bond	4	GLY80, LYS97, VAL211, SER212
	H Bond	Carbon Hydrogen Bond	2	HIS188, GLY210
	Elektrostatik	Pi-Anion	1	MET143
	Hidrofobik	Alkyl	1	ARG189
		Pi-Alkyl	3	VAL127, ILE141, CYS207

Dari hasil analisis dan visualisasi pada tabel 1 diketahui ikatan hidrogen pada ligan alami memiliki residu yang sama dengan ligan pembanding. Selain adanya hubungan ikatan hidrogen dengan residu asam amino, masih banyak faktor yang mempengaruhi seperti interaksi hidrofobik, elektrostatik, *binding energy* dan konstanta inhibisi. Interaksi hidrofobik berperan dalam menentukan stabilitas ligan terhadap reseptor. Interaksi hidrofobik merupakan interaksi yang bersifat menghindari lingkungan cair dan cenderung berkelompok di sebelah dalam struktur globular dari protein [6]. Pembentukan ikatan hidrofobik meminimalkan interaksi residu nonpolar dengan air. Interaksi elektrostatik berperan dalam stabilitas ligan terhadap reseptor. Interaksi elektrostatik merupakan interaksi antara

atom yang disebabkan perbedaan kepolarannya [7]. Interaksi ini termasuk interaksi yang lemah dan bersifat non kovalen sehingga mudah lepas, tetapi karena jumlahnya yang banyak interaksi elektrostatik memiliki kontribusi yang besar dalam pembentukan konformasi protein. Interaksi elektrostatik berupa jembatan garam dan gaya van der Waals. Jembatan garam merupakan ikatan garam antara gugus yang bermuatan berlawanan pada rantai samping asam amino maupun gugus ligan [8].



Gambar 7. Interaksi Ligan Alami (Phosphoaminophosphonic Acid-Adenylate Ester) (a) dan Ligan Pembanding (Kurkumin) (b)

Berdasarkan faktor-faktor yang ada terbukti bahwa ligan alami adalah alternative unggul dalam pengobatan kanker otak sedangkan ligan pembanding belum berpotensi dalam menggantikan ligan alami.

4. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan maka dapat disimpulkan bahwa senyawa turunan kurkuminoid pada kunyit (*Curcuma longa* Linn.) belum berpotensi untuk dijadikan sebagai kandidat obat antikanker otak dalam menggantikan Phosphoaminophosphonic acid-adenylate ester melalui mekanisme penghambatan protein MEK1.

Daftar Pustaka:

- [1] K. M. J. K. B. G. G. V. Manoj L, "Review of brain and brain cancer treatment," *International Journal of Pharma and Bio Sciences*, vol. 1, no. 2, pp. 468-477, 2011.
- [2] E. Meiyanto, "Kurkumin sebagai obat kanker: Menelusuri mekanisme aksi," *Majalah Farmasi Indonesia*, vol. 10, no. 4, pp. 224-236, 1999.
- [3] E. P. Istyastono, "Virtual Screening Campaigns on Isoflavones to Discover Potent Cyclooxygenase-2 Inhibitors.," 2017.
- [4] S. T. P. B. E. C. J. F. G. G. A. H. L. H. J. H. S. S. B. W. J. Y. B. Z. J. a. B. S. Kim, "PubChem Substance and Compound databases," *Nucleic Acids Research*, vol. 44, no. D1, pp. 1202-1213, 2015.
- [5] S. Hari, "In silico molecular docking and ADME/T analysis of plant compounds against IL17A and IL18 targets in gouty arthritis," *Journal of Applied Pharmaceutical Science*, vol. 9, no. 7, pp. 18-26, 2019.
- [6] L. & B. R. Lins, "The hydrophobic effect in protein folding," *Faseb J*, vol. 9, pp. 535-540.
- [7] K. & H. B. Sharp, "Electrostatic interactions in macromolecules: theory and applications," *Annu Rev Biophys Biophys Chem*, vol. 19, pp. 301-322.
- [8] M. D. J. I. Bosshard HR, "Protein stabilization by salt bridges: concepts, experimental approaches and clarification of some misunderstandings," *J. Mol. Recogn*, vol. 17, no. 1, pp. 1-16, 2004.



- [9] M. Arba, Ruslin, Nursan, Maulidiyah and D. H. Tjahjono, "Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA) dan Penambatan Molekul Senyawa Turunan Benzamida sebagai Inhibitor Alosterik Mitogen Enhanced Kinase (MEK)," *Jurnal Kimia VALENSI: Jurnal Penelitian dan Pengembangan Ilmu Kimia*, vol.4,no. 1, pp. 42-51, 2018.
- [10] M. B. O. Rastini, N. K. M. Giantari, K. D. Adnyani and N. P. L. Laksmiani, "MOLECULAR DOCKING AKTIVITAS ANTIKANKER DARI KUERSETIN TERHADAP KANKER PAYUDARA SECARA IN SILICO," *Jurnal Kimia* , vol. 13, no. 2, pp. 180-184, 2019 .
- [11] I. W. Sari, Junaidin and D. Pratiwi, "STUDI MOLECULAR DOCKING SENYAWA FLAVONOID HERBA KUMIS KUCING (Orthosiphon stamineus B.) Pada Reseptor @-GLUKOSIDASE SEBAGAI ANTIDIABETES TIPE 2," *Jurnal Farmagazine* , vol. VII, no. 2, pp. 54-60, 2020.
- [12] H. Muttaqin, C. Saleh and R. Gunawan, "STUDI DOCKING MOLEKULAR SENYAWA KUERSETIN DAN HESPERITIN SEBAGAI INHIBITOR SEL KANKER DENGAN AUTODOCK VINA," *Prosiding Seminar Nasional Kimia* , pp. 237-246 , 2013 .
- [13] B. I. Pantoro, N. M. Rehatta, S. Khaerunnisa, A. S. Veterini and Y. Setiawati, "ANALISA IN SILICO KUNYIT (CURCUMA LONGA) SEBAGAI INHIBITOR MURINE DOUBLE MINUTE 2 PROTEIN UNTUK TERAPI GLIOBLASTOMA MULTIFORME," *Oceana Biomedicina Journal*, vol. 3, no. 2, pp. 8295,2020.
- [14] A. F. M. W. Y. R. A. Eka Prasetya Budi Mulia, "PENINGKATAN BIOAVIABILITAS CURCUMIN DALAM KUNYIT (Curcuma longa) DENGAN MENGGUNAKAN KOMBINASI PIPERIN DALAM LADA HITAM (Piper longum) SEBAGAI ALTERNATIF KEMOTERAPI KANKER PARU," pp. 1-21, 2020.
- [15] A. NURROCHMAD, "REVIEW: Pandangan Baru Kurkumin dan Aktivasnya sebagai Antikanker," *Biofarmasi* , vol. 2, no. 2, pp. 75-80, 2004 .

