



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 (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





Docking Molekular Potensi Antikanker Payudara Protein 1YC4 Dari Senyawa Turunan Kuersetin

Depi Irnasari Sipahutar¹, Destria Roza²

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

*Email korespondensi: devisipahutar215@gmail.com

Abstrak

Penyakit kanker payudara merupakan salah satu penyakit degeneratif yang sangat membahayakan, salah satunya kanker payudara yang banyak menyerang wanita. Kanker payudara dapat diinisiasi salah satunya oleh ekspresi berlebih dari protein HER-2 yang dapat menginduksi terjadinya dimerisasi dan autofosforilasi sehingga memicu terjadinya aktivasi Focal Adhesion Kinase (FAK) sehingga mengakibatkan migrasi dan metastasis pada sel kanker payudara. Kuersetin adalah senyawa golongan flavonoid yang sangat banyak terdapat di alam. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui mekanisme penghambatan ekspresi berlebih dari protein protein HER-2 (PDB ID: 1YC4) oleh senyawa turunan kuersetin yaitu Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-) dengan molecular docking. Metode molecular docking dilakukan dengan beberapa tahapan seperti preparasi protein, validasi docking, preparasi ligand 3D, dan docking antara senyawa turunan kuersetin [Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] teroptimasi dengan protein 1YC4 yang mengacu pada parameter energi ikatan, dimana semakin rendah nilai energi ikatan maka semakin kuat dan stabil ikatan yang terjadi antara senyawa turunan kuersetin [Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] dengan protein 1YC4. Diperoleh hasil docking berupa energi ikatan senyawa turunan kuersetin [Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] dengan protein 1YC4 yaitu -7.2 kkal/mol, sedangkan energi ikatan protein 1YC4 adalah -7.61 kkal/mol. Energi ikatan tersebut menunjukkan bahwa senyawa turunan kuersetin yaitu [Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] memiliki potensi sebagai antikanker payudara karena mampu memodulasi ekspresi berlebih dari protein 1YC4.

Kata kunci : Antikanker, kuersetin, kanker payudara, molecular docking

Abstract

Breast cancer is one of the most dangerous degenerative diseases, one of which is breast cancer which mostly affects women. Breast cancer can be initiated, one of which is by overexpression of the HER-2 protein which can induce dimerization and autophosphorylation, thereby triggering the activation of Focal Adhesion Kinase (FAK) resulting in migration and metastasis in breast cancer cells. Quercetin is a flavonoid compound that is very abundant in nature. The purpose of this study was to determine the mechanism of inhibition of overexpression of 1YC4 protein derived from HER-2 protein by a quercetin derivative compound, namely Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-) by molecular docking. The molecular docking method was carried out in several stages such as protein preparation, docking validation, 3D ligand preparation, and docking between quercetin derivative compounds [Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] optimized with 1YC4 protein which refers to the binding energy parameter, where the lower the bond energy value, the stronger and more stable the bond that occurs between the quercetin derivative [Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] and protein 1YC4. The docking results obtained in the form of binding energy for the quercetin derivative compound [Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] with 1YC4 protein, which is -7.2 kcal/mol, while the binding energy for 1YC4 protein is -7.61 kcal/mol. The binding energy indicates that the quercetin derivative compound [Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] has potential as an anticancer of the breast because it is able to modulate the overexpression of 1YC4 protein.

Keywords: Anticancer, quercetin, breast cancer, molecular docking

1. Pendahuluan

Kanker payudara adalah tumor ganas yang dapat menyerang jaringan payudara yang terdiri dari kelenjar susu (kelenjar pembuat air susu), saluran kelenjar (saluran air susu), dan jaringan penunjang payudara. Kanker payudara menyebabkan sel dan jaringan payudara berubah bentuk menjadi abnormal dan bertambah banyak secara tidak terkendali. Pertumbuhan sel kanker yang tidak terkendali disebabkan kerusakan deoxyribose nucleic acid (DNA), sehingga menyebabkan mutasi gen vital yang mengontrol pembelahan sel [1].

Penyakit kanker payudara merupakan salah satu penyakit degeneratif yang sangat membahayakan, salah satunya kanker payudara yang banyak menyerang wanita. Kanker payudara dapat diinisiasi salah satunya oleh ekspresi berlebih dari protein HER-2 yang dapat menginduksi terjadinya dimerisasi dan autofosforilasi sehingga memicu terjadinya aktivasi Focal Adhesion Kinase (FAK) sehingga mengakibatkan migrasi dan metastasis pada sel kanker payudara [2].

Kuersetin adalah senyawa golongan flavonoid yang sangat banyak terdapat di alam. Beberapa penelitian telah membuktikan bahwa senyawa kuersetin dapat menghalangi penyebaran berbagai jenis kanker seperti kanker paru-paru, prostat, hati, payudara, usus besar, dan leher rahim yang dapat beraksi sebagai antikanker pada regulasi siklus sel, yang berinteraksi dengan reseptor estrogen (ER) tipe II dengan menghambat enzim tirosin kinase. Menurut penelitian yang dilakukan Seo et al, 2016 kuersetin memiliki kemampuan untuk menghambat ekspresi berlebih reseptor HER-2. Dimana pada penelitian tersebut dilakukan uji in vivo yang menghasilkan nilai IC₅₀ sebesar 120 µM. Pengujian terhadap potensi kuersetin sebagai agen antikanker payudara dapat dilakukan dengan mengetahui afinitas dan mekanisme molekuler dari kuersetin terhadap protein target HER-2 dengan menggunakan metode molecular docking secara in silico (pemodelan komputer) [3].

Teknik kimia komputasi ini dapat digunakan untuk mempercepat pemilihan senyawa yang akan diisolasi dan disintesis dengan mengidentifikasi dan optimasi senyawa penuntun dalam proses penemuan obat. Docking molekuler merupakan metode komputasi untuk memprediksi apakah senyawa tersebut mempunyai aktifitas sebelum diujikan. Percobaan dengan docking molekuler ini untuk melihat potensi turunan kuersetin [Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] sebagai antikanker melalui aktifitas dalam menghambat salah satu protein HER-2 [PDB ID: 1YC4 (Crystal Structure of human HSP90alpha complexed with dihydroxyphenylpyrazoles)].

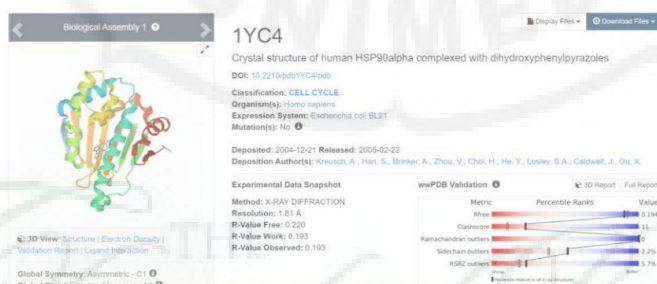
2. Metode Penelitian

2.1 Alat

Seperangkat Laptop Lenovo dengan spesifikasi Windows 10 yang dilengkapi dengan perangkat lunak AutoDock Tools yang dilengkapi program Autodock 4.2 dan Autogrid, Biovia Discovery Studio Visualizer, Pymol, dan Autodock Vina.

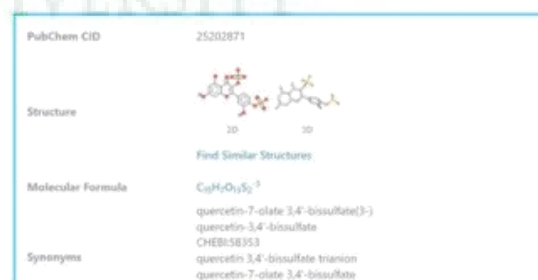
2.2 Bahan

Struktur 3 dimensi senyawa turunan kuersetin diunduh pada website <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>. Struktur protein target HER-2 (PDB ID: 1YC4) diunduh pada website PDB (protein data bank) yaitu <https://www.rcsb.org/>.



Gambar 1. Identitas Protein Target HER-2 (PDB ID: 1YC4).

Quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)



Gambar 2. Identitas Turunan Kuersetin

2.3 Prosedur Penelitian

2.3.1 Preparasi Protein dan Ligand

Perangkat digunakan untuk memisahkan native ligand dari protein sehingga memperoleh berkas native ligand, protein tanpa ligan dengan mengabaikan keberadaan air dalam ekstensi pdb. Protein dan ligand dipersiapkan untuk menjadi berkas siap pakai berekstensi pdb dengan program Discovery Studio. Pemisahan ligan alami dengan makromolekul dilakukan pada aplikasi Discovery Studio. Sedangkan untuk ligan pembanding di ekstrak di aplikasi pymol setelah itu di preparasi di Autodock Tools.

2.3.2 Validasi Metode Docking

Docking molekular terhadap ligan natif dilakukan untuk mencari konformasi 3D native ligand terhadap reseptor dengan memperhatikan koordinat pusat dan besaran gridbox dari binding site pocket dalam satuan angstrom (Vina) atau number of points (AutoDock). Konformasi hasil docking yang diperoleh disejajarkan dengan konformasi native ligand hasil pengukuran Gkristalografi yang dinyatakan dalam nilai root mean square deviation (RMSD).

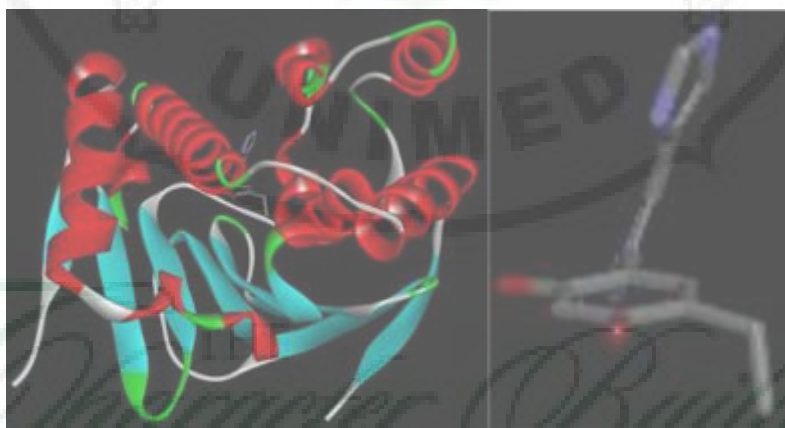
2.3.3 Docking Molekular dan Analisis Data

Docking ligand uji dilakukan untuk menghasilkan nilai binding energy dalam satuan kkal/mol. Nilai binding energy yang digunakan adalah yang memperoleh nilai semakin minus IG ditentukan dengan membandingkan luas daerah.

3. Hasil Dan Pembahasa

3.1 Preparasi Protein HER-2 (PDB ID: 1YC4)

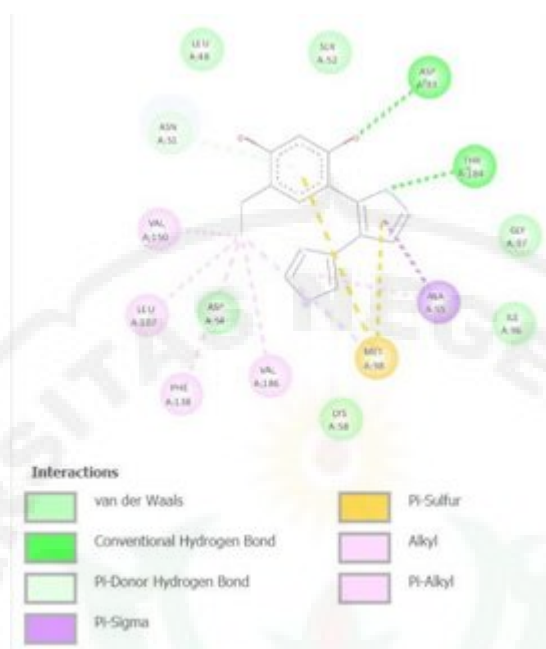
Ligand dan protein yang telah diunduh dipreparasi dengan memisahkan protein dengan native ligandnya dengan menggunakan perangkat lunak *Discovery Studio*, sehingga diperoleh struktur protein tanpa ligan dan molekul air seperti gambar 3. Pemisahan protein dengan native ligand bertujuan untuk menyediakan pocket sebagai tempat senyawa uji berikatan dengan protein HER-2 (PDB ID:1YC4).



Gambar 3. (a) Struktur 3 Dimensi Protein HER-2 (PDB ID: IYC4) tanpa ligan dan (b) native ligand protein HER-2 (PDB ID:1YC4)

3.2 Validasi Metode Molecular Docking

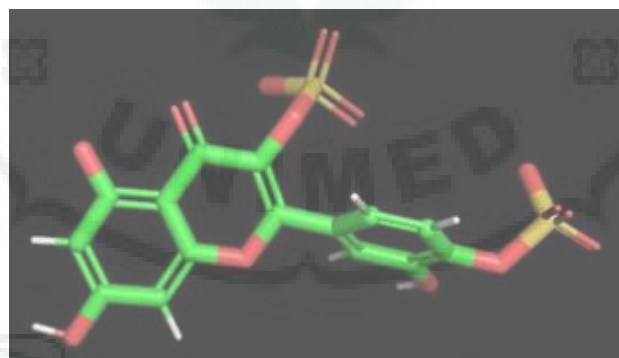
Validasi metode *molecular docking* dilakukan menggunakan aplikasi *Autodock Tools* dengan menambatkan ulang (*redocking*) *native ligand* protein HER-2 dengan protein HER-2 (PDB ID: IYC4) yang sudah dipreparasi. Validasi dengan menggunakan gridbox antara ligan dan protein dilakukan setiap algoritma docking. Proses docking perlu membuat gridbox untuk menentukan nilai koordinat pusat serta besaran gridbox tempat interaksi ligan dan protein, sehingga gridbox harus menutupi semua ligan dan reseptor. Parameter validasi metode adalah nilai RMSD. RMSD merupakan jarak penyimpangan dari posisi ikatan *native ligand* dengan protein setelah didocking-kan terhadap posisi ikatan *native ligand* yang sebenarnya [4]. Nilai RMSD ini dapat disebut pula dengan jarak ikatan. Nilai RMSD yang diperoleh pada penelitian ini adalah 0,34 Å yang berarti bahwa metode *molecular docking* yang digunakan telah tervalidasi. Visualisasi interaksi validasi metode *molecular docking* dapat dilihat pada gambar 4.



Gambar 4. Visualisasi interaksi protein HER-2 (PDB ID:1YC4) dengan *native ligand*-nya.

3.3 Optimasi Struktur 3 Dimensi Senyawa Turunan Kuersetin

Senyawa kuersetin yang diekstrak di aplikasi Pymol dan di preparasi di autodock tools. Hasil optimasi senyawa kuersetin ditunjukkan pada gambar 5.

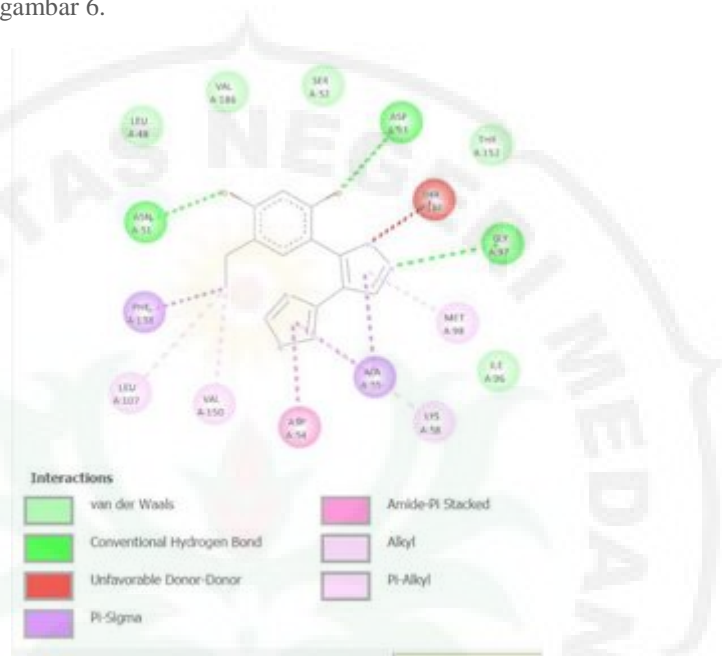


Gambar 5. Hasil Optimasi Struktur 3 Dimensi Senyawa Turunan Kuersetin.

3.4 Docking Turunan Kuersetin pada Protein HER-2 (PDB ID:1YC4)

Docking senyawa turunan kuersetin yang telah dioptimasi pada protein HER-2 (PDB ID:1YC4) dilakukan menggunakan aplikasi *Autodock Tools* dengan prosedur dan koordinat yang sama seperti pada validasi metode yang telah tervalidasi. Hasil *docking* turunan kuersetin pada protein HER-2 (PDB ID:1YC4), diperoleh 7 konformasi ikatan antara turunan kuersetin dengan protein HER-2 (PDB ID:1YC4) yang selanjutnya dipilih satu konformasi dengan nilai energi ikatan terendah yang menunjukkan ikatan paling stabil. Hasil *docking* antara turunan kuersetin dan *native ligand* dengan protein HER-2 (PDB ID:1YC4) menunjukkan bahwa energi ikatan antara kuersetin dengan protein HER-2 (PDB ID:1YC4) bernilai negatif. Pada protein HER-2 (PDB ID:1YC4), turunan kuersetin memiliki energi ikatan yang lebih tinggi dibandingkan dengan *native ligand*. Hal tersebut menunjukkan potensi turunan kuersetin dalam berikatan dengan sisi aktif HER-2 (PDB ID:1YC4) lebih lemah dari *native ligand*-nya, tetapi tetap memiliki kemampuan untuk berikatan. Nilai energi ikatan *native ligand* dan kuersetin pada protein target HER-2 (PDB ID:1YC4) berturut-turut yaitu -7.61 kkal/mol dan -7.2 kkal/mol

Berdasarkan hal tersebut senyawa turunan kuersetin mampu berinteraksi dengan protein HER-2 (PDB ID:1YC4) dengan menunjukkan adanya ketersediaan ikatan van der Waals, ikatan hidrogen konvensional, pi-sigma, alkyl, dan pi-alkyl. Hal ini menunjukkan sisi aktif tempat berikatan antara *native ligand* dan kuersetin pada protein HER-2 (PDB ID:1YC4) sudah sama sehingga akan menghasilkan afinitas yang sama pula dengan *native ligand*-nya dalam menghambat protein HER-2 (PDB ID:1YC4). Visualisasi docking kuersetin dengan protein HER-2 (PDB ID:1YC4) ditunjukkan pada gambar 6.



Gambar 6. Visualisasi Interaksi Hasil Docking Turunan Kuersetin pada Protein HER-2 (PDB ID:1YC4).

4. Kesimpulan

Dari hasil *molecular docking*, senyawa turunan kuersetin memiliki afinitas terhadap protein HER-2 (PDB ID:1YC4) dengan energi ikatan -7.2 kkal/mol. Hal ini menunjukkan bahwa senyawa turunan kuersetin yaitu [quercetin-7-olate 3,4'-bissulfate(3-)] memiliki potensi sebagai antikanker payudara karena mampu memodulasi ekspresi berlebih dari protein HER-2 (PDB ID: 1YC4).

Daftar Pustaka

- [1] American Cancer Society. 2017. Breast Cancer Treatment Guideline. Atlanta: American Cancer Society.
- [2] Rastini, M. B. O., dkk., 2019. Molecular Docking Aktivitas Antikanker Dari Kuersetin Terhadap Kanker Payudara Secara In Silico. *Jurnal Kimia*. 13(2):180-184.
- [3] Seo et al, 2016, Quercetin Induces Caspase Dependent Extrinsic Apoptosis Through Inhibition of Signal Transducer and Activator of Transcription 3 Signaling in HER 2-Overexpressing BT 474 Breast Cancer Cells. *Oncology Report*, 36: 31-42.
- [4] Nauli, T. 2014. Penentuan Sisi Aktif Selulase *Aspergillus Niger* dengan *Docking Ligan*. *JKTI*. 16(2).