



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 <math>[Fe_4(Htrz)_{10}(Trz)_5]Cl_3</math> Menggunakan Perhitungan Kimia Komputasi Dengan Berbagai Fungsi/ Basis Set</i> Asep Wahyu Nugraha, Ani Sutiani, Muhamad A Martoprawiro dan Djulia Onggo.....	11-17
<i>SrTiO<sub>3</sub> 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
<b><u>Makalah Pendidikan Kimia</u></b>	
<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
<b><u>Makalah Poster</u></b>	
<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





## Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan 4-Aminochalcone sebagai Antikanker Radikal Hidroksil

Indah Fitri<sup>1\*</sup>, Destria Roza<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>Jurusan Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Negeri Medan  
Jl. Willem Iskandar Psr. V, Medan

\*Email korespondensi: indahfitri2020@gmail.com.

### Abstrak

Kalkon merupakan anggota keluarga flavonoid, kalkon berpotensi sebagai antioksidan, antikanker, antimikroba, antiinflamasi, dan aktivitas antiprotzoal. Turunan kalkon yaitu 4-aminochalcone merupakan senyawa yang berpotensi sebagai antikanker radikal hidroksil. Pada penelitian ini dilakukan analisa hubungan kuantitatif sturuktur dan aktivitas (HKSA) untuk mendapatkan variasi senyawa baru turunan 4-aminochalcone yang lebih berpotensi sebagai antikanker radikal hidroksil. Optimasi model senyawa turunan 4-aminochalcone menggunakan metode semi empirical berbasis CNDO menggunakan aplikasi hyperchem. Sedangkan analisis regresi linear dengan SPSS 25.0 digunakan untuk mencari hubungan variable bebas (descriptor) dengan variable terkait. Model HKSA terbaik diperoleh adalah  $\text{LogIC}_{50} = 1.222 - (0.004*SA) - (0.026*\text{LogP}) - (2.532E-6*E_{\text{free}})$  dengan kriteria statistik  $R = 0.975$ ,  $R^2 = 0.9433$ , Fhitung/ Ftabel = 0.660917,  $Q^2 = -4.34582$ . Berdasarkan data tersebut, didapatkan prediksi variasi senyawa baru turunan 4-aminochalcone dengan ligan substituen pendonor hidroksil dan fosfor berpotensi sebagai antikanker radikal hidroksil namun, tidak lebih baik dibandingkan dengan senyawa induk.

**Kata kunci :** turunan 4-aminochalcone, HKSA, radikal hidroksil, antikanker

### Abstract

*Chalcone is a member of the flavonoid family, it has potential as an antioxidant, anticancer, antimicrobial, anti-inflammatory, and antiprotzoal activity. The derivative of chalcone, namely 4-aminochalcone, is a compound that has the potential as an anticancer of hydroxyl radicals. In this study, quantitative analysis of the structure and activity relationship (HKSA) was carried out to obtain a variety of new compounds derived from 4-aminochalcone which have more potential as anticancer hydroxyl radicals. Optimization of the model of 4-aminochalcone derivatives using a semi-empirical method based on CNDO using hyperchem application. Meanwhile, linear regression analysis with SPSS 25.0 was used to find the relationship between the independent variable (descriptor) and the related variable. The best HKSA model obtained is  $\text{LogIC}_{50} = 1.222 - (0.004*SA) - (0.026*\text{LogP}) - (2.532E-6*E_{\text{free}})$  with statistical criteria  $R = 0.975$ ,  $R^2 = 0.9433$ ,  $F_{\text{count}}/ F_{\text{table}} = 0.660917$ ,  $Q^2 = -4.34582$ . Based on these data, it was obtained predictions of variations in the new compound 4-aminochalcone derivative with hydroxyl donor substituent ligands and phosphorus as potential anticancer hydroxyl radicals but not better than the parent compound.*

**Keywords:** 4-aminochalcone derivative, HKSA, hydroxyl radical, anticancer

### Pendahuluan

Radikal bebas merupakan atom atau molekul yang memiliki satu atau lebih elektron tidak berpasangan pada orbit luarnya, sehingga menyebabkan molekul ini tidak stabil dan menimbulkan sifat sangat reaktif [1]. Jenis radikal bebas yang paling banyak terdapat dalam sistem biologis tubuh adalah radikal yang berasal dari oksigen, dan dikenal sebagai spesies oksigen reaktif (SOR), antara lain anion superoksida ( $\text{O}_2^{\cdot-}$ ), radikal hidroksil ( $\text{OH}^{\cdot}$ ), radikal alkoksil ( $\text{RO}^{\cdot}$ ) dan radikal peroksil ( $\text{ROO}^{\cdot}$ ). Radikal hidroksil merupakan senyawa radikal yang paling berbahaya karena mempunyai tingkat reaktivitas sangat tinggi. Radikal hidroksil dapat merusak tiga jenis senyawa yang penting untuk mempertahankan integritas sel yaitu, asam lemak tak jenuh, DNA dan protein [2]. Untuk mencapai kestabilan, molekul ini akan bereaksi dengan molekul sekitar untuk memperoleh pasangan elektron. Reaksi yang terus menerus berlangsung di dalam tubuh ini jika tidak dihentikan dapat menimbulkan berbagai penyakit seperti kanker, jantung, katarak, penuaan dini, serta penyakit degenarif lainnya [1]. Indonesia mencatat kanker sebagai penyebab kematian nomor tujuh di Indonesia dan menjadi penyebab kematian nomor dua di dunia. Angka penderita kanker selalu meningkat setiap tahun, bahkan di tahun 2012 sebanyak 8,2 juta kematian penyebabnya adalah kanker [3]. IARC merilis pada 14 Desember Globocan 2020 tentang beban kanker global, menunjukkan

bahwa itu telah meningkat menjadi 19,3 juta kasus dan 10 juta kematian akibat kanker pada tahun 2020 [4]. Kanker adalah pertumbuhan sel yang tidak normal yang mana sel tersebut bisa tumbuh dan menyebar ke bagian tubuh lainnya bahkan menyebabkan kematian [3].

Salah satu metode kimia komputasi yang populer dalam desain obat adalah Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA). Metode HKSA ini cukup terbukti baik sebagai alat untuk memprediksi struktur senyawa obat baru dengan aktivitas baru berdasarkan struktur dasar yang telah diketahui aktivitasnya dari eksperimen [7]. Pemodelan HKSA memerlukan deskriptor untuk menentukan nilai aktivitas suatu senyawa. Deskriptor yang digunakan pada penelitian ini adalah descriptor  $E_{free}$ , MD, HF, SA, LogP. Penelitian ini menggunakan deskriptor struktur elektronik untuk menghasilkan persamaan HKSA karena interaksi antar molekul sangat dipengaruhi langsung oleh muatan atom-atom pada ujung aktifnya.

Pada penelitian ini, senyawa yang dikaji adalah senyawa turunan 4-aminochalcone, yang merupakan turunan kalkon. Kalkon merupakan anggota keluarga flavonoid, kalkon berpotensi sebagai antioksidan, antikanker, antimikroba, antiinflamasi, dan aktivitas antiprotozoal [5]. Turunan kalkon yaitu 4-aminochalcone merupakan senyawa yang berpotensi sebagai antikanker radikal hidroksil [6]. Aminochalcones merupakan kelas penting dari chalcones yang mengandung gugus -NR<sub>2</sub> pada keduanya cincin A atau cincin B dari kalkon [5].

Penelitian ini diharapkan mendapatkan model persamaan HKSA pada turunan senyawa 4-aminochalcone dari hubungan antara deskriptor dan aktivitas biologi sehingga dapat menghasilkan usulan senyawa turunan 4-aminochalcone dengan aktivitas melawan antikanker yang lebih baik dari senyawa-senyawa yang sudah ada.

## 2. Metode Penelitian

### 2.1 Data dan Alat

Data yang digunakan dalam penelitian ini berupa data set struktur dan aktivitas senyawa antikanker dengan struktur turunan 4-aminochalcone. Peralatan yang digunakan dalam penelitian ini adalah perangkat keras dan perangkat lunak. Perangkat keras yang digunakan berupa laptop dan perangkat lunak yang digunakan adalah software chemdraw, excel, hyperchem 8.0 dan SPSS 25.0.

### 2.2. Prosedur penelitian

#### Optimasi Geometri

Setiap senyawa yang digunakan dalam penelitian ini dibuat terlebih dahulu secara dua dimensi (2D) dengan ChemDraw Ultra 7.0 (file .skc), kemudian dibuka dengan HyperChem versi 8.0 dan ditambahkan dengan atom hidrogen menggunakan Add H and model Build pada menu build, sehingga didapat struktur tiga dimensi (3D). Klik menu setup, pilih semi empiris CNDO pada metode. Selanjutnya dilakukan optimasi geometri struktur dilakukan dengan memilih geometry optimization dari menu compute, dan tunggu sampai struktur selesai dioptimasi. Proses optimasi geometri selesai bila pada bar muncul (convergen = yes).

#### Perhitungan deskriptor elektronik, hidrofobik dan sterik

Perhitungan dilakukan dengan mengklik star log pada menu file untuk merekam data, kemudian pilih single point pada menu compute, tunggu beberapa saat dan klik stop log pada menu file untuk mengakhiri proses perekaman hasil perhitungan. Data yang digunakan dalam penelitian HKSA ini adalah Free energy, momen dipole yang dapat dihitung dengan menggunakan compute-properties. Data HOMO, LUMO dihitung dengan menggunakan compute-orbitals. Energi orbital HOMO merupakan energi pada orbital molekul paling tinggi yang terisi elektron, sedangkan energi orbital LUMO merupakan energi pada orbital molekul terendah yang tidak terisi elektron. Selisih energi orbital HOMO dan LUMO didapatkan dengan mengurangkan energi orbital HOMO dan LUMO pada dua simetri yang terdekat. Nilai Surface area (Approx), log P, dan Mass Nilai log P dari setiap senyawa dapat dilihat dari perhitungan sifat molekul tambahan yang dilakukan dengan QSAR properties pada program HyperChem.

#### Analisis Korelasi Analisis korelasi dilakukan dengan menggunakan software Excel.

Pada langkah ini, masing-masing deskriptor dicari tingkat korelasinya terhadap aktivitas antikanker (log IC<sub>50</sub>). Dimana nilai IC<sub>50</sub> diperoleh dari jurnal referensi. Selanjutnya semua data perhitungan deskriptor dimasukkan ke dalam SPSS 25.0, kemudian di analisis dengan metode regresi linier. Variabel terikat (dependent) adalah log IC<sub>50</sub> dan variabel bebas (independent) adalah, Total energy, energy elektronik, heat of formation, log p, surface area, mass, HOMO, LUMO, momen dipole, dan free energy. Metode yang digunakan adalah metode backward. Hasil dari proses ini yaitu predictors.

#### Analisis Statistik Regression Linear

Pengambilan data uji dilakukan secara acak berdasarkan kombinasi prediksi calon deskriptor. Analisis Regresi linear pada dengan metode enter. Variabel terikat adalah log IC<sub>50</sub>. Dan variabel bebas berdasarkan hasil kombinasi. Model-model tersebut diuji validitasnya dengan mempertimbangkan nilai- nilai R, R<sup>2</sup> dan F, untuk mendapatkan model persamaan terbaik. persamaan yang diterima harus memiliki nilai R (koefisien korelasi) dan R<sup>2</sup> (koefisien determinan) mendekati 1, Fhitung / Ftabel > 5 (F sebagai ukuran perbedaan tingkat signifikansi dari



model regresi). Model persamaan HKSA terbaik ditentukan dengan mempertimbangkan nilai ketiga kriteria. diatas. Kemudian dihitung nilai konstanta sebagai variabel yang digunakan dalam menentukan nilai  $q^2$ . Nilai konstanta dapat dihitung dengan mengurangi data dari satu senyawa secara bergantian pada SPSS dengan menggunakan metode enter, dan variabel terikat bebas dan terikat yang digunakan tetap.

#### Desain Senyawa Variasi Baru

Desain molekul dilakukan dengan modifikasi substituen dan posisi substitusi. Posisi substitusi ditentukan berdasarkan seri senyawa yang digunakan pada saat mendapatkan persamaan HKSA terbaik. Selanjutnya dilakukan perhitungan untuk semua senyawa uji. Dengan menggunakan persamaan HKSA terbaik, dihitung aktivitas antikanker teoritik IC50 dari senyawa hasil desain. Senyawa dengan IC50 yang kecil berarti memiliki aktivitas antikanker yang tinggi dan senyawa tersebut dapat diusulkan untuk disintesis di laboratorium.

### 3. Hasil dan Pembahasan

#### 3.1. Optimasi Geometri

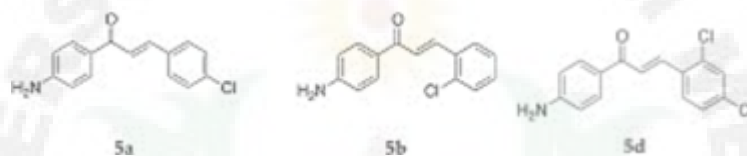


Figure 1. Struktur kimia turunan 4-aminokalkon dengan substitusi kloro pada cincin B

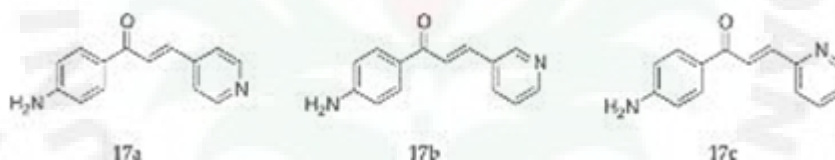


Figure 2. Struktur kimia turunan 4-aminokalkon yang mengandung cincin piridin

Metode optimasi geometri yang digunakan pada penelitian ini adalah metode semi empiris CNDO. Metode semi empiris adalah metode pendekatan dengan mengabaikan seluruh tumpang tindih diferensial. CNDO (Complete neglect of differential overlap), metode ini mengabaikan hampir semua sifat dan pergantian electron dan tidak membedakan antara keadaan yang memiliki nilai konfigurasi electron sama tapi membedakan nilai spin electron. Metode ini digunakan untuk menghitung sifat keadaan optimasi geometri dan energy total. Kelemahan dari metode ini adalah hasil dari metode sedikit kurang bagus karena pada integral dua electron masih tersisa.

#### 3.2. Data Deskriptor Elektronik, Hidrofobik, dan Sterik

Deskriptor elektronik yang berupa selisih energi orbital HOMO-LUMO. Selisih energi orbital energi orbital HOMO-LUMO menggambarkan kemudahan suatu sistem molekul untuk mengalami eksitasi ke keadaan elektronik yang lebih tinggi. Selisih energi orbital HOMO-LUMO yang lebih rendah akan menggambarkan bahwa suatu sistem molekul relatif lebih mudah mengalami eksitasi ke keadaan elektronik yang lebih tinggi. Selain itu, selisih energi HOMOLUMO juga dapat menggambarkan stabilitas suatu molekul. Molekul dengan selisih energi orbital HOMO-LUMO yang besar berarti molekul tersebut memiliki stabilitas yang tinggi, sehingga memiliki reaktivitas yang rendah dalam reaksi-reaksi kimia.

Data-data deskriptor hidrofobik ( $\log P$ ) dan sterik. Nilai  $\log P$  berkaitan dengan distribusi obat dalam tubuh. Semakin positif nilai  $\log P$  senyawa akan cenderung berada pada fase non polar dari pada fase polar, sedangkan semakin negatif nilai  $\log P$  senyawa akan cenderung berada pada fase polar dari pada fase non polar, yang berarti senyawa tersebut hanya larut dalam cairan tubuh saja dan sulit untuk menembus membran biologi, sehingga tidak dapat berikatan dengan reseptor

**Table 1. Data descriptor elektronik, hidrofobik dan setrik**

SENYAWA	E_ELE	E_TOTAL	HOMO	LUMO	LOG P	MD	MR	HF	SA	E_FREE
5A	-547097.7 693	-96975.25 257	-7.256391	3.76487	1.15	5.12 7	257. 72	-2378.8 85176	297.3 1	-96975. 3
5B	-560635.7 183	-96747.86 584	-6.492124	3.902774	1.15	6.64 1	257. 72	98448	271.6 4	-96747. 9
5D	-608842.6 979	-106428.9 311	-7.277532	3.611401	0.92	3.14 6	292. 16	41406	301.3 9	-106429
17A	-504558.5 983	-89878.62 689	-7.337268	3.536392	-0.1	5.04 5	224. 26	93273	252.5 9	-8878.6
17B	-504604.6 194	-89877.67 58	-7.173388	3.955598	0.02	6.48 6	224. 26	42181	253.6 5	-89877. 7
17C	-505130.6 136	-89872.79 849	-7.239928	3.733501	1.27	3.49 26	224. 26	64872	254.2 2	-89872. 8

### 3.3. Analisis Korelasi

Analisa ini digunakan data IC50 dari radikal hidroksil yang diperoleh dari jurnal referensi. Data tersebut kemudian di log kan sehingga diperoleh data Log IC50, seperti pada table 2.

**Table 2. Nilai IC50 dan Log IC50**

IC50	LOG IC50
1.43	0.155336037
1.62	0.209515015
1.33	0.123851641
1.35	0.130333768
2.18	0.338456494
2.03	0.307496038

Dari data descriptor yang didapatkan pada table 1. dan data table 2. Kemudian di entry ke dalam SPSS. Dianalisa menggunakan metode regresi linear. Selanjutnya adalah menentukan variabel indenpendet dependent, variabel dependent yang digunakan dalam penelitian ini adalah log IC50 dan sebagai variabel independennya adalah semua data descriptor pada table 1. Regresi linear ini dilakukan dengan metode backward. Pada tahapan ini diperoleh hasil berupa predictor yang akan digunakan calon descriptor untuk menentukan persamaan HKSA. Calon descriptor: E\_free, MD, HF, SA, LogP.

### 3.4. Analisis Statistik Regression Linear

Pada tahap ini, dilakukan kombinasi calon descriptor guna mendapatkan nilai R yang baik. Nilai R yang baik adalah  $\geq 0.7$ . Pada penelitian ini dilakukan lima kali kombinasi untuk mendapatkan nilai R terbaik. Nilai R yang tertinggi dapat digunakan dalam mencari persamaan HKSA, yaitu pada kombinasi SA, LogP, E\_free.

**Table 3. Kombinasi Calon descriptor**

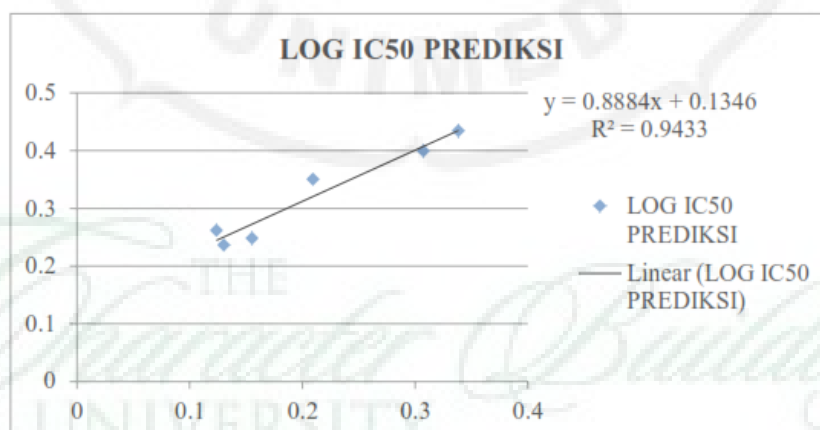
Kombinasi	R
E_free, MD, HF	0.612
MD, HF, SA	0.630
HF, SA, LogP	0.711
SA, LogP, E_free	0.975
LogP, E_free, MD	0.475

Selanjutnya adalah mencari persamaan HKSA dengan memasukkan seluruh data descriptor dalam SPSS kemudian dianalisis dengan metode regression linear. Dengan variabel terikat log IC50 dan variabel bebasnya adalah SA, LogP, E\_free. dan metode yang digunakan adalah enter. Sehingga diperoleh nilai koefisien yang akan digunakan untuk membuat persamaan HKSA. Persamaan HKSA yang diperoleh adalah  $\text{LogIC50} = 1.222 - (0.004 \cdot \text{SA}) - (0.026 \cdot \text{LogP}) - (2.532 \cdot 10^{-6} \cdot \text{E\_free})$ . Kemudian Persamaan ini digunakan dalam mencari Log IC50 Prediksi.

**Table 4. Nilai IC50 dan Log IC50 prediksi**

LOG IC50 PREDIKSI	IC50
0.24840146	1.771746
0.350505683	2.241329
0.261998228	1.828093
0.236720615	1.724728
0.434450336	2.719258
0.39965793	2.509909

Selanjutnya dilakukan mencari persamaan HKSA yang akan divalidasi, dengan cara membuat grafik antara Log IC50 eksperimen dengan Log IC50 prediksi. Tahapan ini dilakukan untuk membuang data outlier jika nilai  $R^2 \leq 0.7$ . Pada penelitian ini, nilai  $R^2 \geq 0.7$  yaitu sebesar 0,9433. Oleh karena itu, tidak perlu membuang data outlier. Dapat dilihat pada grafik 1.



**Grafik 1. Grafik hubungan antara Log IC50 eksperimen dengan Log IC50 prediksi**

Persamaan HKSA tetap digunakan yaitu  $\text{LogIC50} = 1.222 - (0.004 \cdot \text{SA}) - (0.026 \cdot \text{LogP}) - (2.532 \cdot 10^{-6} \cdot \text{E\_free})$ . Dari persamaan didapatkan nilai  $F_{hit} = 12.666$ ,  $F_{tabel} = 19.16429$ ,  $F_{hit}/F_{tabel} = 12.666 / 19.16429 = 0.660917$  dan  $q^2 = -4.34582$ .

### 3.5. Desain Senyawa Obat Baru

HKSA dianggap efektif dalam perancangan senyawa obat karena mampu menghasilkan model persamaan yang dapat dipakai untuk memprediksi aktivitas senyawa obat baru secara akurat. Berdasarkan persamaan HKSA akhir selanjutnya dilakukan proses modifikasi struktur senyawa turunan 4-aminokalkon dengan ligan substituen

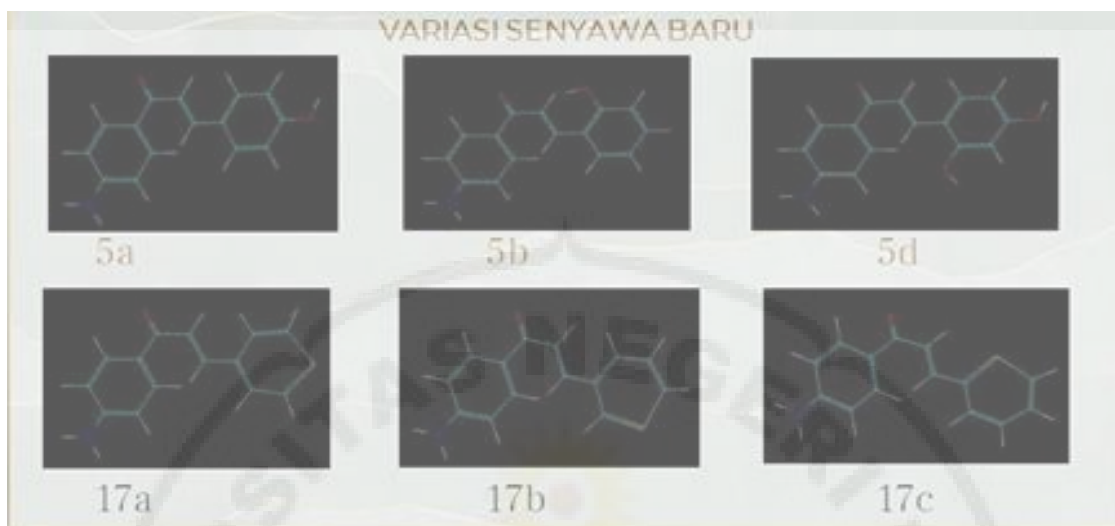
pendonor hidroksil dan fosfor. Prediksi dilakukan dengan mencari Log IC50 prediksi variasi senyawa baru, dan membandingkan dengan Log IC50 prediksi terkecil senyawa induk.

Table 5. Data hasil prediksi aktivitas variasi senyawa baru

SENYAWA VARIASI	KONS TANT A	DESKRIPTOR						LogIC50 PREDIKSI	IC50
		SA		LogP		E_free			
		Koef	Nilai	Koef	Nilai	Koef	Nilai		
ACUAN								0.236720615	1.724728
5A OH	1.222	- 0.004	272.6 2	- 0.026	0.34	-2.53E- 06	-98837.6	0.381776803	2.408667
5B OH	1.222	- 0.004	251.4 7	- 0.026	0.34	-2.53E- 06	-98383.9	0.465228035	2.918959
5D OH	1.222	- 0.004	259.3 7	- 0.026	-0.68	-2.53E- 06	-110173	0.463478036	2.907221
17A P	1.222	- 0.004	249.0 6	- 0.026	-0.25	-2.53E- 06	-86796.2	0.445527978	2.78951
17B P	1.222	- 0.004	250.8 6	- 0.026	-0.13	-2.53E- 06	-86790.6	0.438313799	2.743556
17C P	1.222	- 0.004	260.1 4	- 0.026	1.13	-2.53E- 06	-86807.1	0.401235577	2.519043



Gambar 3 Struktur senyawa induk menggunakan Hyperchem



Gambar 4. Struktur variasi senyawa baru menggunakan hyperchem

Dari data diatas, variasi senyawa turunan 4-aminochalcone memiliki potensi sebagai antikanker radikal hidroksil, namun tidak lebih baik dibandingkan dengan senyawa induk. Hal ini disebabkan IC<sub>50</sub> variasi senyawa baru turunan 4-aminochalcone lebih besar dibandingkan senyawa induk;  $Q^2$  dibawah 0,5; serta nilai Fhitung/ Ftabel dibawah 5 dapat menyebabkan aktivitas senyawa lebih kecil.

#### 4. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian HKSA, deskriptor molekuler yang mempengaruhi aktivitas antikanker radikal hidroksil pada senyawa turunan 4-aminochalcone adalah deskriptor E\_free, MD, HF, SA, LogP. Persamaan HKSA pada senyawa turunan 4-aminochalcone adalah  $\text{LogIC}_{50} = 1.222 - (0.004 \cdot \text{SA}) - (0.026 \cdot \text{LogP}) - (2.532 \cdot 10^{-6} \cdot \text{E\_free})$  dengan kriteria statistik  $R = 0.975$ ,  $R^2 = 0.9433$ , Fhitung/ Ftabel = 0.660917,  $Q^2 = -4.34582$ . Berdasarkan data tersebut, didapatkan prediksi variasi senyawa baru turunan 4-aminochalcone dengan ligan substituen pendonor hidroksil dan fosfor berpotensi sebagai antikanker radikal hidroksil namun, tidak lebih baik dibandingkan dengan senyawa induk.

#### Daftar Pustaka

- [1] A. N. Pratama and H. Busman, "Potensi Antioksidan Kedelai (Glycine Max L) Terhadap Penangkapan Radikal Bebas," *J. Ilm. Kesehat. Sandi Husada*, vol. 11, no. 1, pp. 497–504, 2020, doi: 10.35816/jiskh.v10i2.333.
- [2] C. P. Maanari, E. Suryanto, and J. Pontoh, "Aktivitas Penangkal Radikal Hidroksil Fraksi Flavonoid dari Limbah Tongkol Jagung pada Tikus Wistar," *J. MIPA UNSRAT*, vol. 3, no. 2, pp. 134–138, 2014, doi:10.35799/jm.3.2.2014.5990.
- [3] F. Keperawatan, U. Padjadjaran, F. I. Budaya, and U. Padjadjaran, "Pendidikan Kesehatan tentang Pencegahan Penyakit Kanker dan Menjaga Kualitas Kesehatan," *Media Karya Kesehat.*, vol. 3, no. 1, pp. 59–69, 2020.
- [4] Globocan, "GLOBOCAN 2020: New Global Cancer Data," *UICC*, Dec. 2020.
- [5] R. Irfan, S. Mousavi, M. Alazmi, R. Shah, and Z. Saleem, "molecules Review of of Aminochalcones," no. Scheme 1, 2020, doi: 10.3390/molecules25225381.
- [6] S. D. Marliyana, D. Mujahidin, and Y. M. Syah, "A Green Synthesis of Chalcones As an Antioxidant and Anticancer A Green Synthesis of Chalcones As an Antioxidant and Anticancer," 2018, doi: 10.1088/1757-899X/299/1/012077.
- [7] M. N. Kasmui and S. B. W. Kusuma, "Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Dan Aktivitas Antimalaria Senyawa Turunan Quinoxalin," *J. MIPA*, vol. 39, no. 1, pp. 51–56, 2016.