



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 4110 Anti Kanker Paru</i> Yohansen Wahyudi dan Destria Roza	440-444
<i>Docking Molekuler Potensi Antikanker Payudara Protein Iyc4 Dari Senyawa Turunan Kuersetin</i> Depi Irnasari Sipahutar dan Destria Roza	445-449





Studi In Silico Potensi Senyawa Asam Askorbat Sebagai Anti Kanker Hati

Nia Veronika^{1*}, dan Destria Roza¹

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

*Email korespondensi: nnia.xz@gmail.com

Abstrak

Kanker hati merupakan tumor hati yang mencakup baik primer maupun metastase. Kanker hati dapat disebabkan oleh sirosis hati, hepatitis B dan C, aflatoksin, hemokromatosis dan lingkungan. Analisis vitamin C (asam askorbat) menunjukkan bahwa asupan vitamin C yang memadai efektif menurunkan risiko berkembangnya kanker payudara, leher rahim, kolon, rektum, paru-paru, mulut, prostat, perut dan hati. Tujuan penelitian ini adalah untuk melihat interaksi antara senyawa 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid terhadap reseptor HepG2 sebagai anti kanker hati melalui metode molecular docking. Senyawa 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid ditambatkan pada reseptor target menggunakan program AutoDock Tools (versi 1.5.6), divisualisasi dengan Discovery Studio Visualizer, Struktur protein HepG2 dengan kode GK04 diunduh dari RCSB Protein Data Bank dan struktur 3D dari senyawa asam askorbat diambil dari situs PubChem. Proses penambatan dilakukan secara bertahap dari penyiapan ligan dan protein, validasi metode docking, proses docking, hingga analisis data. Energi ikatan yang diperoleh dari docking senyawa 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid terhadap makromolekul HepG2 adalah -5,53 kcal/mol dibandingkan dengan energi ikatan ligan bawaan, yakni -8,25 kcal/mol. Berdasarkan hasil yang diperoleh, ligan 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid belum berpotensi sebagai anti kanker hati.

Kata Kunci: kanker hati, docking, asam askorbat

Abstrack

Liver cancer is a liver tumor that includes both primary and metastases. Liver cancer can be caused by liver cirrhosis, hepatitis B and C, aflatotoxin, hemochromatosis and the environment. Analysis of vitamin C (ascorbic acid) shows that adequate intake of vitamin C is effective in reducing the risk of developing breast, cervical, colon, rectum, lung, mouth, stomach and liver cancers. The purpose of this study was to examine the interaction between the compound 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid on the HepG2 receptor as an anti-liver cancer through molecular docking method. The compound 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid was tethered to the target receptor using the AutoDock Tools program (version 1.5.6), visualized with Discovery Studio Visualizer, HepG2 protein structure with code GK04 downloaded from the RCSB Protein Data Bank and 3D structure from ascorbic acid compounds were taken from the PubChem website. The docking process is carried out in stages from the preparation of ligands and proteins, validation of the docking method, the docking process, to data analysis. The bond energy obtained from the docking of the 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid compound to the HepG2 macromolecule was -5.53 kcal/mol compared to the bond energy of the innate ligand, which was -8.25 kcal/mol. Based on the results obtained, the 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid ligand has no potential as an anti-liver cancer.

Keyword: live cancer, docking, ascorbic acid.

1. Pendahuluan

Kanker adalah penyakit yang ditandai dengan pertumbuhan dan penyebaran yang tidak terkendali sel abnormal, penyebaran yang tidak terkendali ini dapat menyebabkan kematian. Paru-paru, payudara, kanker perut, kolorektal, dan hati adalah penyebab kematian terbesar setiap tahun [1]. Kanker hati merupakan tumor hati yang mencakup baik primer maupun metastase, tumor hati primer muncul dari hepatosit, jaringan penghubung, pembuluh darah atau duktus empedu. Kanker hati dapat disebabkan oleh sirosis hati, hepatitis B dan C, aflatoksin, hemokromatosis dan lingkungan. Kanker hati dapat menimbulkan tanda dan gejala yaitu mual dan muntah, perut tidak nyaman, nyeri perut, perut kembung, mudah lelah, kulit terasa gatal, penurunan berat badan dan demam. Dampak dari penyakit kanker hati yaitu pecahnya tumor, pendarahan GI akibat varise, kakeksia progresi [2].

Angka kematian untuk kanker hati lebih banyak dari dua kali lipat, dari 2,8 (per 100.000) pada 1980 menjadi 6,7 pada 2016, dengan peningkatan 2,4% per tahun dari 2007 hingga 2016. Faktor risiko: Sekitar 70% kasus kanker hati di Indonesia yang disebabkan oleh infeksi kronis dengan virus hepatitis B (HBV) dan virus hepatitis C (HCV), alkohol berat

konsumsi, dan merokok. Risiko juga mungkin meningkat dengan mengonsumsi makanan yang terkontaminasi aflatoxin (Racun dari jamur yang bisa tumbuh dengan tidak benar makanan yang disimpan, seperti kacang-kacangan dan biji-bijian) [3].

Ada beberapa jenis pengobatan kanker hati, yaitu kemoterapi, radioterapi dan pembedahan. Efek samping pengobatan kanker menggunakan metode kemoterapi menyebabkan rambut rontok, mual, muntah, diare, kerentanan terhadap infeksi, trombositopenia, neuropati, dan mialgia sedangkan radiasi menyebabkan efek mual dan muntah, dan pembedahan tidak sepenuhnya mampu menghilangkan yang rusak jaringan akibat kanker. Oleh sebab itu, berbagai penelitian yang ada saat ini dikembangkan untuk mencari senyawa baru, terutama yang berasal dari tanaman, yang dapat berperan dalam pengobatan kanker [4].

Asam askorbat adalah vitamin larut air yang penting dan merupakan salah satu terapi ortodoks awal yang telah lama digunakan dalam bidang alternatif dan pelengkap obat untuk pengobatan kanker, dengan keamanan yang mendalam dan kemanjuran anekdot [5]. Banyak studi klinis dan laboratorium telah mengungkapkan efeknya pada kanker pencegahan dan pengobatan. Salah satunya yaitu pada penelitian yang dilakukan oleh Hongwei dkk pada tahun 2017 menyatakan bahwa vitamin C (asam askorbat) dapat secara efektif membunuh sel kanker hati dan khususnya membasmi sel induk kanker hati, yang memberikan bukti lebih lanjut yang mendukung vitamin C sebagai strategi terapi baru untuk pengobatan HCC [6].

Studi penambatan molekul (molecular docking) adalah suatu proses komputasi untuk mencari ligan yang cocok secara geometris dan energi terendah ke situs pengikatan protein. Metode ini merupakan salah satu metode yang digunakan untuk meniru peristiwa interaksi suatu molekul ligan dengan protein yang menjadi targetnya pada uji *in vitro* melalui simulasi model menggunakan komputer. Molekular docking sering digunakan untuk memprediksi afinitas dan aktivitas molekul kecil. Maka molekular docking memainkan peranan penting dalam desain obat secara rasional [7]. Tujuan penelitian ini adalah untuk melihat interaksi antara senyawa 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid terhadap reseptor sebagai anti kanker hati sehingga dapat menjadi alternatif sumber bahan baku obat melalui metode Hep-G2 melalui metode molekular docking.

2. Metode Penelitian

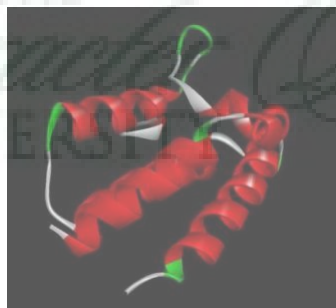
2.1 Alat dan Bahan

Laptop Lenovo dengan spesifikasi Processor AMD APU A9-9425 dual-core 3,1 GHz dengan Turbo Core 3,7 GHz. Sistem Operasi Windows 10, dilengkapi dengan program Autodock Tools 1.5.6, Discovery Studio Visualizer®, Notepad®, PyMOL®. Struktur tiga dimensi protein dari reseptor HepG2 yang digunakan dalam studi docking ini diunduh dari RCSB Protein Data Bank (www.rcsb.org) dengan kode PDB GK04 dengan resolusi 1.25 Å. Struktur ligan 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid dalam bentuk 3D .sdf diambil dari situs PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>).

2.2 Prosedur Penelitian

2.2.1 Preparasi Reseptor

Reseptor yang digunakan dalam penelitian ini yaitu protein sel kanker hati HepG2 dengan kode GK04 yang di unduh dari www.pdb.org. File reseptor tersebut diunduh dengan format .pdb. Pemisahan antara makromolekul dengan residu seperti molekul air dan ligan alami dilakukan menggunakan program Discovery Studio Visualizer®. Hasil pemisahan tersebut disimpan dalam format .pdb dan kemudian dengan menggunakan program Autodock Tools dilakukan pemunculan atom hidrogen yang bersifat polar karena dapat berpotensi untuk menghasilkan ikatan di dalam reseptor dan disimpan dengan format .pdbqt.



Gambar 1 Protein Sel Kanker Hati HepG2

2.2.2 Preparasi Ligan

Ligan yang digunakan yaitu ligan alami (6~{R})~{N}-(4-chlorophenyl)-1-methyl-8-(1-methylpyrazol-4-yl)-5,6-dihydro-4~{H}-[1,2,4]triazolo[4,3-a][1]benzazepin-6-amine dan ligan pembanding 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid. Ligan alami diperoleh dengan cara memisahkan ligan tersebut dari makromolekulnya menggunakan Discovery Studio Visualizer® dan disimpan dalam format .pdb,



2.2.3 Validasi Metode

Validasi metode dilakukan untuk mengetahui apakah program yang digunakan untuk penambatan molekul sesuai persyaratan atau tidak. Validasi metode molecular docking dilakukan dengan cara redocking antara ligan bawaan dari reseptor target menggunakan perangkat lunak Autodock Tools®. Analisis yang digunakan untuk mengevaluasi hasil validasi yaitu nilai RMSD, situs pengikatan yang ditemukan dan parameter yang digunakan dianggap valid jika hasil $RMSD \leq 2\text{\AA}$.

2.2.4 Penambatan Molekul :Preparasi Reseptor dan Ligan

Pada tahap pertama dalam pengaturan Autodock Tools®, dilakukan pembuatan folder kerja khusus untuk ligan ulami dan ligan pembanding yang akan digunakan untuk proses penambatan molekul sehingga secara otomatis hasilnya akan tersimpan di dalam folder tersebut. Pengaturan folder yang akan digunakan dilakukan dengan memilih File-Preference-Set-Startup Directory-Set-Chose-File-Ok-Dismiss. Selanjutnya dibuka reseptor yang telah dipreparasi dengan memilih File-Read Molecule-Choose Receptor-Open dan reseptor dioptimasi dengan penambahan atom hidrogen yang dilakukan dengan memilih Edit-Hydrogens-Add Hydrogen-Ok simpan dengan format .pdbqt dengan cara pilih Macromolekul-Output -Save as PDBQT .Setelah itu, dimasukan ligan dengan memilih Ligand-Input-Open sampai ketika ligan muncul dilakukan pemeriksaan rotasi dengan mengoreksi kebenaran pada rotasi ligan melalui Ligand-Torsion Tree-Choose Root, melihat titik rotasi dari ligan melalui Ligand-Torsion Tree-Detect Root, (Ligand-Torsion Tree-Choose Torsion, dan hasil ligan disimpan berformat .pdbqt.

2.2.5 Mengatur Grid Box

Tahap kedua melakukan pengaturan grid box untuk reseptor dengan memilih Grid-Macromolecule-Choose- Receptor-Select Molecule hasil dari reseptor ini disimpan berformat .pdbqt, menentukan jenis peta yang dibuat dengan Grid-Set Map Types-Choose Ligand-Select Ligand, kemudian dilakukan pengaturan koordinat grid box penambatan antara (6~{R})~{N}-(4-chlorophenyl)-1-methyl-8-(1-methylpyrazol-4-yl)-5,6-dihydro-4~{H}-[1,2,4]triazolo[4,3-a][1]benzazepin-6-amine dan reseptor adalah $x=10.477$, $y=71.498$ dan $z=-3.038$ dengan ukuran grid box $32 \times 28 \times 32$. Dilakukan pengaturan grid box yang sama pada ligan 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid. Setelah selesai pilih File-Close Saving Current lalu hasilnya disimpan melalui cara memilih Grid-Output-Save GPF maka diperoleh berformat (grid.gpf).

2.2.6 Mengatur Parameter Docking

Tahap ketiga melakukan pengaturan parameter docking dengan cara memilih makromolekul berupa reseptor berformat pdbqt dengan membuka Docking-Macromolecule-Set Rigid Filename-Choose Receptor, memilih ligan berformat pdbqt melalui Docking-Ligand-Choose-Open Ligand-Accept, dan mengatur parameter docking sesuai energi yang digunakan dengan memilih Docking-Search Parameter-Genetic Algorithm-Maximum Number of evals:Short -Accept. Setelah itu dipilih Docking-Output-Genetic Algoritehm lalu beri nama file dock.dpf kemudian save.

2.2.7 Running Docking

Dilakukan runningdocking setelah semua proses sebelumnya telah selesai dengan baik, Melalui perangkat lunak AutoDockTools (versi 1.5.6) penambatan molekul dilakukan dengan cara menjalankan program AutoGrid melalui Command Prompt dengan perintah "autogrid4.exe -p grid.gpf -l grid.glg" tekan enter, kemudian untuk menjalankan program Autidock melalui Command Prompt dengan perintah "Autodock4.exe -p dock.dpf -l dock.dlg" tekan enter. Setelah selesai, melihat parameter yang dihasilkan (ΔG dan Cluster) melalui perangkat lunak notepad. Hasil dari kalkulasi penambatan molekul yang didapatkan dibandingkan dengan hasil penambatan molekul yang lainnya.

2.2.8 Analisis dan Visualisasi Penambatan Molekul

Analisis dan visualisasi penambatan molekul ini berupa nilai ΔG (energi ikatan bebas) yang paling terendah yaitu bentuk terbaik dan interaksi terhadap reseptor yang dapat dibandingkan antara beberapa ligan alami dengan ligan 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid yang diperoleh dari hasil kalkulasi penambatan dilihat di output dalam format notepad. Interaksi ikatan ligan pada reseptor dan residu yang terlibat pada ligan uji kemudian divisualisasi dengan perangkat lunak Discovery Studio Visualizer untuk melihat ikatan antar ligan pada situs target (Active Binding Site) terhadap reseptor secara molecular docking.

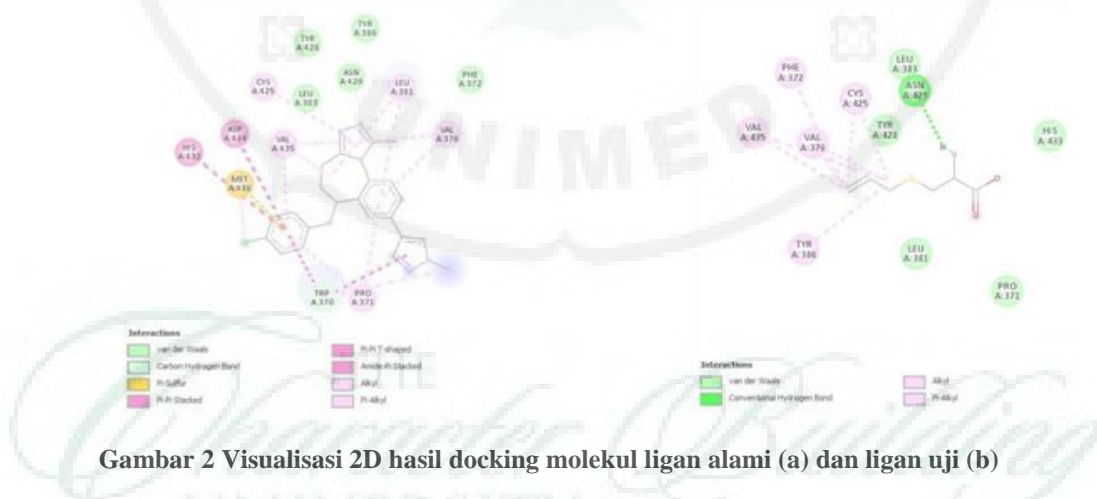
3. Hasil Dan Pembahasan

Penambatan senyawa aktif Rimpang Kunyit dengan protein target menghasilkan 4 parameter uji, yaitu nilai Energi Ikatan Bebas (ΔG), Konstanta Inhibisi (K_i), RMDS, dan Residu Asam Amino. Kekuatan afinitas ikatan ligan dengan protein dipengaruhi oleh Konstanta Inhibisi (K_i), dimana besar afinitas akan berbanding terbalik dengan nilai K_i . Semakin besar nilai K_i , maka semakin kecil afinitas ligan dengan reseptor. Energi ikatan bebas menggambarkan stabilitas dan spontanitas pengikatan antar ligan dengan protein target. Semakin rendah nilai ΔG , maka ikatan yang dihasilkan akan semakin stabil dan spontan[7]. Interaksi permukaan dapat digambarkan sebagai pengenalan antara ligan dan protein target saat proses penambatan. Nilai interaksi

permukaan yang tinggi akan memberikan peluang tinggi bagi senyawa aktif untuk berinteraksi dengan protein target [8]. Sedangkan adanya residu asam amino antara ligan dan reseptor menunjukkan bahwa ligan mampu menghambat aktifitas protein target. Senyawa aktif yang diprediksi memiliki ikatan yang kuat dengan protein target adalah senyawa aktif yang memiliki ikatan hidrogen dan residu asam amino protein reseptor yang sama dengan control.

Tabel 1 Hasil docking ligan dan reseptor HepG2

Reseptor	Ligan Uji	RMSD	Ikatan Energi Bebas(ΔG)	Konstanta Inhibisi	Interaksi	Residu Asam Amino
HepG2(PDB ID:6K04)	(6~{R})~{N}-(4-chlorophenyl)-1-methyl-8-(1-methylpyrazol-4-yl)-5,6-dihydro-4~{H}-[1,2,4]triazolo[4,3-a][1]benzazepin-6 Amine	1.02 Å	-8.25 kcal/mol	898.19nM	Pi-Sulfur Alkyl Pi-Alkyl Pi-Pi T-shaped	MET438 PRO371 CYS425 VAL435 LEU381 VAL376 ASP434 HIS433
	5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid	3.25 Å	-1.94 kcal/mol	38.070.000nM	Conventional Hydrogen Bond Alkyl Pi-Alkyl	ASN429 TYR386 VAL376 VAL435 PHE372 CYS425



Gambar 2 Visualisasi 2D hasil docking molekul ligan alami (a) dan ligan uji (b)

Dari hasil docking yang telah dilakukan didapatkan nilai energi bebas ligan alami adalah -8.25 kcal/mol, dengan konstanta inhibisi 898.19nM dan RMSD 1.02 Å. Residu asam amino yang terbentuk dari ikatan tersebut adalah MET438, PRO371, CYS425, VAL435, LEU381, VAL376, ASP434 dan HIS433(Tabel 1). Studi *in silico* interaksi ligan uji dengan reseptor didapatkan nilai energi bebas -1.94 kcal/mol, dengan konstanta inhibisi 38.070.000nM dan RMSD 3.25 Å. Residu asam amino yang terbentuk dari ikatan tersebut adalah TYR386, VAL376, VAL435, PHE372, CYS425 dan membentuk satu ikatan hidrogen dengan asam ASN429. Docking ligan 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid pada reseptor HepG2 memperlihatkan nilai afinitas yang lebih kecil dibandingkan dengan ligan alaminya.

4. Kesimpulan



Penambatan ligan uji 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid pada reseptor memberikan energi ikatan bebas bernilai -1.94 kcal/mol, dimana nilai ini lebih besar dari pada energi ikatan bebas dari ligan alami. Docking ligan uji pada reseptor memperlihatkan nilai afinitas yang lebih kecil. Kekuatan afinitas ikatan ligan dengan protein berbanding terbalik dengan nilai K_i . Semakin besar nilai K_i , maka semakin kecil afinitas ligan dengan reseptor. Penglihatan secara umum dari interaksi kedua ligan dengan reseptor memperlihatkan bahwa asam amino yang sering terlibat dalam interaksi adalah VAL435, VAL376 dan CYS425. Berdasarkan hasil yang diperoleh, 5,6-O-Benzylidene-L-ascorbic acid belum memiliki potensi untuk berikatan dengan reseptor target HepG2 karena memiliki nilai ikatan bebas yang lebih besar daripada ligan alaminya.

Daftar Pustaka

- [1] Lelita, R., Gunawan, R., & Astuti, W. (2017). Studi Docking Molekular Senyawa Kuersetin, Kalkon dan Turunannya Sebagai Inhibitor Sel Kanker Payudara MC-7 (Michigan Cancer Foundation-7). *Jurnal Atomik*, 2(2), 190-196.
- [2] Joyce, B., dan Jane Hokanse Hawks .(2014). *Medical Surgical Nursing*. Jakarta. Salemba Medika
- [3] American Cancer Society. (2019). *Our Research: Cancer Facts & Figures 2019*. Diakses dari <https://www.cancer.org/research/cancer-facts-statistics/all-cancer-facts-figures/cancer-facts-figures-2018.html>.
- [4] Frimayanti, N., Mora, E., & Anugrah, R. (2018). Study of Molecular Docking of Chalcone Analogue Compound as Inhibitors for Liver Cancer Cells HepG2. *Computer Engineering and Applications Journal*, 7(2), 137-147.
- [5] Chen, Q., Polireddy, K., Chen, P., & Dong, R. (2015). The unpaved journey of vitamin C in cancer treatment. *Canadian journal of physiology and pharmacology*, 93(12), 1055-1063.
- [6] Wan, J., Zhou, J., Fu, L., Li, Y., Zeng, H., Xu, X., ... & Jin, H. (2021). Ascorbic Acid Inhibits Liver Cancer Growth and Metastasis in vitro and in vivo, Independent of Stemness Gene Regulation. *Frontiers in Pharmacology*, 2235
- [7] Narko, T., Benny, P., Riska, P., Dang, S., & Faridhatul, K. (2017). Molecular Docking Study of Bulb Of Bawang Dayak (*Eleutherine palmifolia* (L) Merr) Compound as Anti Cervical Cancer. *Jurnal Ilmiah Farmako Bahari*, 8(2), 1-14.
- [8] Muttaqin, F. Z. (2019). Molecular Docking and Molecular Dynamic Studies of Stilbene Derivative Compounds As Sirtuin-3 (Sirt3) Histone Deacetylase Inhibitor on Melanoma Skin Cancer and Their Toxicities Prediction. *Journal of Pharmacopolium*, 2(2).