



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 Asessment Higher Order Thinking Skill (HOTS) Untuk Mengukur Kemampuan Berpikir Tingkat Tinggi Pada Materi Hidrolisis Garam</i> Alfi Rizkina Lubis, Ajat Sudrajat, Asep Wahyu Nugraha	173-181
<i>Analisis Model Rasch: Identifikasi Instrumen Tes Representasi Kimia Topik Materi Berdasarkan Kurikulum Cambridge</i> Mufti Muhammad Hamzah, E Eliyawati, Rika Rafikah Agustin	182-188
<i>Pengaruh Media Physics Education Technology (PhET) Terhadap Aktivitas Dan Hasil Belajar Siswa Pada Materi Bentuk Molekul</i> Suci Setia Crise Manullang, Lisnawaty Simatupang	189-195
<i>Pengaruh Macromedia Flash Berbasis Model Problem Based Learning Terhadap Motivasi dan Hasil Belajar Siswa SMA pada Materi Laju Reaksi Inki</i> Yun Lamtiur dan Lisnawaty Simatupang	196-200
<i>Pengaruh Penggunaan Media Pembelajaran Kimia Interaktif iSpring Presenter terhadap Hasil Belajar dan Motivasi Siswa pada Materi Laju Reaksi</i> Yoshe Vego Passarella Simarmata dan Ida Duma Riris	201-211
<i>Validasi dan Respon Media Video Animasi (PowToon) Berbasis Religius Pada Pembelajaran Ikatan Kimia</i> Ade Kurnia Putri Tanjung dan Ayi Darmana	212-218
<i>Pengembangan Model Pembelajaran Inovatif Berbasis Proyek Berorientasi Kkni Untuk Meningkatkan Kompetensi Mahasiswa</i> Bajoka Naingolan, Manihar Situmorang, Ramlan Silaban	219-229
<i>Pengembangan Sumber Belajar Inovatif Berbasis Proyek Untuk Materi Isolasi Senyawa Organik Bahan Alam Dalam Menghadapi Era New Normal</i> Dessy Novianty Pakpahan, Marham Sitorus, dan Saronom Silaban	230-235
<i>Implementasi Asesmen Kompetensi Minimum Materi Asam Basa Konteks Sainifik</i> Izza Nabilatunnisa, Wiwi Siswaningsih, Nahadi	236-244
<i>Pengaruh Model Pembelajaran Problem Based Learning Menggunakan Macromedia Flash Terhadap Aktivitas Dan Hasil Belajar Ikatan Kimia</i> Siswa Cessya Novianindra Br Tarigan dan Gulmah Sugiharti	245-251
<i>Validitas Tes Diagnostik untuk Materi Pembelajaran Ikatan Kimia SMA</i> Winda Fourthelina Sianturi dan Zainuddin Muchtar	252-256
<i>Pengembangan Lembar Kerja Peserta Didik (LKPD) Berbasis Discovery Learning Pada Materi Asam Basa</i> Eratania Surbakti, Makharany Dalimunthe	257-267
<i>Analisis Kebutuhan Bahan Ajar Kimia Koloid Berbasis Online untuk Siswa SMA</i> Elssya Dwi Imanuella Manullang, Ramlan Silaban	268-273
<i>Pengaruh Penggunaan Media Webblog Terhadap Motivasi Dan Hasil Belajar Siswa Sma Pada Materi Ikatan Kimia</i> Febiola Rohani Marpaung dan Murniaty Simorangkir	274-279
<i>Validitas dan Reliabilitas Instrumen Penelitian Tes dan Non Tes Pada Materi Laju Reaksi</i> Freshya Sionitha Sembiring dan Haqqi Annazili Nasution	280-284
<i>Analisis Kebutuhan Media Pembelajaran Kimia Berbasis Komputer Untuk Mengajarkan Laju Reaksi Pada Siswa SMA</i>	

Julianse Lydia Nababan dan Ramlan Silaban	285-290
<i>Pengembangan Media Pembelajaran Berbasis Android pada Materi Ikatan Kimia</i>	
Sabrina Khairani Hasibuan dan Destria Roza	291-297
<i>Pengembangan Bahan Ajar Kontekstual Berbasis Evaluasi HOTS Untuk Meningkatkan Hasil Belajar dan Nilai Karakter Siswa Pada Materi Asam Basa di SMA N 4 Pematang Siantar</i>	
Frida Claudia Sianipar dan Marham Sitorus	298-308
<i>Pengembangan E-Modul Pembelajaran Pada Pembuatanbriket Limbah Kulit Durian Dan Sabut Kelapa Pada Materi Senyawa Hidrokarbon Kelas XI</i>	
Dessy Agustina, Julia Maulina, Hasrita Lubis	309-315
<i>Pengembangan Bahan Ajar Berbasis Problem Based Learning (PBL) Pada Materi Ikatan Ion Dan Kovalen Untuk Kelas X</i>	
Ayu Inggrias Tuty dan Jamalum Purba	316-322
<i>Pengembangan Bahan Ajar Berbasis Project Based Learning (PjBL) Pada Materi Ikatan Ion Dan Kovalen Untuk Kelas X</i>	
Else R Sigalingging dan Jamalum Purba	323-327
<i>Pengembangan Media Pembelajaran Terintegrasi Scrabble Berbasis Android Pada Materi Senyawa Hidrokarbon Kelas XI</i>	
Elmirawanti Sihite dan Nora Susanti	328-334
<i>Implementasi Animasi Flash Terhadap Aktivitasdan Hasil Belajar Siswa Pada Materi Ikatan Kimia</i>	
Elsima Nainggolan dan Nora Susanti	335-341
<i>Analisis Respon Siswa Terhadap Aplikasi Daringsebagai Sumber Dan Media Belajar Alternatif Pada Mata Pelajaran Kimia Selama Pandemi</i>	
Jumasari Siregar dan Nurfajrian	342-345
<i>Pengembangan Media Pembelajaran Berbasis Android dengan menggunakan Software Construct 2 pada Materi Laju Reaksi</i>	
Natalin Pertiwi Siahaan dan Nora Susanti	346-350
<u>Makalah Poster</u>	
<i>Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (Hksa) Dan Docking Molekuler Senyawaturunan 2-Aminokalkon Sebagai Obat Antikanker Tulang</i>	
Tico Guinnessha S, Rissah Maulina, SyaSya Azzaythounah, Lidia Mutia Sari, DestriaRoza	351-356
<i>Doking Molekular Potensi Antikanker Leukemia Protein P388 Dengan Senyawa Turunan Chalcone</i>	
Nadia Givani Br Hotang dan Destria Roza	357-361
<i>Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan 4- Aminochalcone sebagai Antikanker Radikal Hidroksil</i>	
Indah Fitri dan Destria Roza	362-368
<i>Studi Molecular Docking Senyawa Antosianidin Dari Ekstrak Buah Jamblang (Syzygium cumini) Sebagai Senyawa Anti-Tumor Secara In Silico</i>	
Dea Gracella Siagian dan Destria Roza	369-374
<i>Docking Molekular Potensi Antikanker Payudara Protein3ert Dengan Senyawa Turunan Kuinin</i>	
Ruth Yohana Saragih, Nurul Hidayah, Destria Roza	375-381
<i>Studi In Silico Potensi Senyawa Asam Askorbat Sebagai Anti Kanker Hati</i>	
Nia Veronika dan Destria Roza	382-386

<i>Analisis In-Silico Senyawa Aktif Flavonoid Tanaman Kelor Sebagai Inhibitor Main Protease SARS-CoV-2 Melalui Metode Molecular Docking</i> Saud Salomo dan Destria Roza	387-395
<i>Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA) Senyawa Turunan 4- Aminochalcone Sebagai Anti Leukemia Murine (L1210)</i> Wirna Dewi Zebua dan Destria Roza	396-403
<i>Docking Senyawa Kalkon Terhadap Reseptor Estrogen-Q (1QKM) Sebagai Antikanker Payudara</i> Cindy Agnesia dan Destria Roza	404-407
<i>Uji Docking Senyawa Alkaloid Quinolizidine dan Analognya Sebagai Inhibitor Reseptor Estrogen pada Kanker Payudara</i> Indira Aviza, Anggita Leontin Sitorus, Destria Roza	408-415
<i>Uji Docking Senyawa Alkaloid Piperidine dan Analognya Sebagai Inhibitor Reseptor Estrogen pada Kanker Payudara</i> Anggita Leontin Sitorus, Indira Aviza, Destria Roza	416-423
<i>Studi Docking Molekuler Senyawa Turunan Kurkuminoid Pada Kunyit (Curcuma longa Linn.) Sebagai Inhibitor Protein Kinase Mek1 Sel Kanker Otak Dengan Autodock</i> Vina Nadia Agnes Cantika Nadeak dan Destria Roza	424-430
<i>Docking Ligan Anti Kanker Prostat dengan Ligan Pembanding Senyawa Turunan Asam Galat Menggunakan Autodock 4.2 dan Discovery Studio</i> Astri Devi Br Pakpahan dan Destria Roza	431-439
<i>Docking Molekuler Potensi Senyawa 2,6-Dimethylocta-3,5,7-Trien-2-Ol Terhadap Senyawa 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





Kajian Senyawa KB Sebagai Kanker Nasofaring Epidermoid Menggunakan Metode CNDO (Hyperchem) Dan Regresi Linear (SPSS)

Hidayani¹ dan Destria Roza²

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

²Jurusan Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Negeri Medan
Jl. Willem Iskandar Psr. V, Medan

*Email korespondensi : hidayani448@gmail.com

Abstrak

Karsinoma nasofaring (KNF) merupakan tumor ganas yang paling banyak dijumpai dalam bidang THT di Indonesia yang dapat mengenai semua golongan umur. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui aktivitas dari turunan senyawa 2-aminochalcone terhadap sel kanker epidermis karsinoma nasofaring menggunakan metode CNDO (Hyperchem) dan regresi linear (SPSS). Dimana pada senyawa dengan $IC_{50} = 1.30$ diuji cobakan ke variasi turunan chalcone dengan persamaan $\text{Log } IC_{50} = -12.207 + (0.005 * MR) - (0.385 * MD) + (3.163 * LUMO)$. Diharapkan nilai $IC_{50} = 0.63898$ dengan penambahan gugus Cl. Maka dapat disimpulkan bahwa hasil nilai IC_{50} merupakan nilai yang kuat dan baik dikarenakan nilainya lebih rendah dibanding nilai IC_{50} awal.

Kata Kunci : chalcone, KNF, CNDO, SPSS, log IC_{50} Prediksi

Abstract

*Nasopharyngeal carcinoma (NPC) is the most common malignant tumor in the ENT field in Indonesia, affecting all age groups. This study aims to determine the activity of the derivative of 2-aminochalcone against epidermal cancer cells of nasopharyngeal carcinoma using CNDO (Hyperchem) and linear regression (SPSS) methods. Where the compound with $IC_{50} = 1.30$ was tested on variations of chalcone derivatives with the equation $\text{Log } IC_{50} = -12.207 + (0.005 * MR) - (0.385 * MD) + (3.163 * LUMO)$. The resulting IC_{50} value = 0.63898 with the addition of a Cl group. So it can be concluded that the IC_{50} value is a strong and good value because the value is lower than the initial IC_{50} value.*

Keywords : chalcone, KNF, CNDO, SPSS, log IC_{50} Prediction

1. Pendahuluan

Kanker adalah suatu penyakit pertumbuhan sel karena di dalam organ tubuh timbul dan berkembang biak sel-sel baru yang tumbuhan normal, cepat, dan tidak terkendali dengan bentuk, sifat dan gerakan yang berbeda dari sel asalnya, serta merusak bentuk dan fungsi organ asalnya. Kanker sering dikenal sebagai tumor, tetapi tidak semua tumor disebut kanker. Tumor merupakan satu sel liar yang berada dibagian tubuh dan terus membesar di lokasi yang tetap atau tidak menyebar ke bagian tubuh lain. Mengakibatkan terbentuknya benjolan di bagian tubuh tertentu dan jikalau tidak diobati dengan tepat sel tumor berubah menjadi kanker. Berbeda dengan sel tumor yang tidak menyebar kebagian tubuh lain, sel kanker akan terus membelah diri dengan cepat dan tidak terkontrol menyebabkan sel kanker sangat mudah menyebar ke beberapa bagian tubuh melalui pembuluh darah dan pembuluh getah bening. Kanker nasofaring adalah tumor ganas yang timbul didaerah nasofaring area diatas tenggorok dan dibelakang hidung [1].

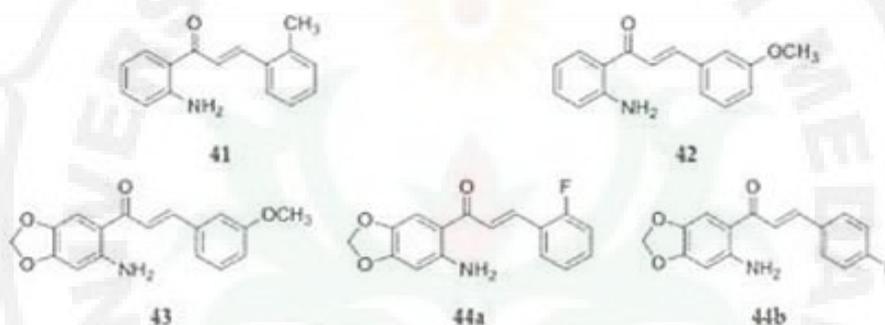
Studi HKSA ini meliputi studi penemuan senyawa baru, studi kimia anorganik dan studi kimia organik. Dalam mempelajari aktivitas suatu obat dengan metode HKSA (Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas) atau Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) melibatkan beberapa parameter. Sehingga, penelitian ini mengkaji dan menganalisis hubungan kuantitatif antara sifat fisika dan sifat kimia senyawa turunan metoksi-aminokalkon terhadap aktifitas biologismurine leukemia yang dinyatakan dalam Log IC_{50} . IC_{50} (Inhibition Concentration 50%) yaitu konsentrasi yang dapat merendam 50% radikal bebas DPPH. Penelitian ini menggunakan tiga buah parameter, yaitu parameter hidrofobik berupa koefisien partisi (Log P), parameter sterik berupa Surface Area Grid (Luas Permukaan), Refraktifitas (Refractivity) dan massa molekul, dan parameter elektronik berupa teoriorbital molekul seperti HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital), energi orbital molekul LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), Energi total (E_{tot}), energy binding

(E_Binding) dan energi bebas (free energy) selain berdasarkan teori orbital molekul ada juga berdasarkan semi teoritis seperti energy elektronik dan berdasarkan percobaan seperti dipole moment yang dihitung dengan perangkat lunak HyperChem 8.0 menggunakan metode semiempiris CNDO. Metode ini dipilih karena dirancang untuk memproduksi panas pembentukan dan struktur dari sejumlah besar molekul organik. Selanjutnya, parameter-parameter tersebut dianalisis hubungannya secara statistik dengan aktivitas biologis yang diambil dari literatur menggunakan software IBM SPSS Statistics 20 [2].

2. Metode Penelitian

2.1 Alat dan bahan

Peralatan yang digunakan dalam penelitian ini berupa perangkat keras dan perangkat lunak. Perangkat keras yang digunakan berupa computer milik rekan saya. Perangkat lunak yang digunakan ada dua, software Hyperchem professional release 8.0.8 for windows molecular modeling system. Untuk menggambar dan mengetahui informasi senyawa yang digambar. Lalu software IBM Statistics version 20 untuk analisis statistik. Bahan yang digunakan berupa senyawa turunan 2-aminochalcone yang berjumlah 5 senyawa, diperoleh dari review jurnal "molecules journal" [3]. Data senyawa dengan aktivitas biologi terdapat pada tabel 1 dan untuk struktur induk terdapat pada Gambar 1.



Gambar 1. Senyawa 2-aminochalcone

Tabel 1. Nilai IC_{50} 2-aminochalcone terhadap kanker nasofaring epidermoid

Compound	KB
41	1.35
42	0.65
43	0.52
44 a	1.50
44 b	3.10

2.2 Prosedur Kerja

2.2.1 Preparasi Struktur 2 Dimensi

Pembuatan struktur 2 dimensi 5 analog senyawa turunan 2-aminochalcone dengan menggunakan program ChemDraw 2004, disimpan dalam format .mol.

2.2.2 Optimasi Geometri

Setelah 5 analog senyawa turunan 2- aminochalcone di gambar dalam bentuk 2 dimensi, kemudian masing-masing analog dilakukan optimasi geometrinya dengan menggunakan program HyperChem 8.0. Struktur hasil optimasi geometri tersebut di-upload, kemudiandilakukan perhitungan single point dengan output data dikumpulkan pada file rekaman (file.log). Untuk memulai rekaman dilakukan start log dan untuk mengakhiri rekaman dilakukan stoplog. Selanjutnya dilakukan compute-properties, sedangkan HOMO dan LUMO dapat dihitung pada compute-orbitals.

2.2.3 Pemilihan dan Perhitungan Deskriptor

Variabel bebas yang digunakan pada analisis meliputi deskriptor molekuler adalah parameter Hidrofobik yaitu Log P (Parameter Elektronik) yaitu Energi Elektronik, Energy Total, High Occupied Molecular (HOMO), Low Occupied Molecular (LUMO), Free Energy, Moment Dipole, Heatof Formation. Parameter Sterik yaitu Massa, dan Surface Area (Approx). Variabel terikat yang digunakan yaitu parameter elektronik yaitu Log IC_{50} eksperimen dari molecules jurnal.

2.2.4 Perhitungan Log IC_{50} Eksperimen



Data IC50 diperoleh dari jurnal review Log IC50, perhitungan dilakukan pada MS Excel 2007 (Epidermoid Carcinoma of The Nasopharynx), penelitian molecules journal [3]. Diolah menjadi data berdasarkan IC50 2-aminochalcone terhadap KB.

2.2.5 Uji Kolerasi

Data deskriptor molekuler yang didapat dari optimasi geometri kemudian dilakukan Uji korelasi (R) untuk melihat keeratan hubungan variabel bebas dengan variabel terikat. Uji korelasi dilakukan dengan menggunakan aplikasi SPSS versi 20 dari data MS Excel 2007. Pada uji korelasi nilai deskriptor molekuler senyawa turunan 2-aminochalcone yang diperoleh dari perhitungan optimasi geometri, dijadikan sebagai variabel bebas. Sedangkan Log IC50 sebagai variabel terikat.

2.2.6 Analisis Persamaan HKSA

Analisis regresi linear berganda dilakukan dengan program SPSS for Windows versi 20 menggunakan metode backward. Analisis regresi linear berganda dilakukan untuk menentukan parameter statistik seperti R (koefisien korelasi), R^2 (koefisien determinan), dan F (perbedaan ukuran tingkat kepercayaan). Hasil uji korelasi dijadikan sebagai acuan untuk analisis regresi linear kombinasi.

2.2.7 Analisis Kolerasi

Analisis korelasi dilakukan dengan metode two-tailed dan koefisien korelasi Persamaan menggunakan software SPSS 20. Pada langkah ini, semua parameter hidrofobik, parameter elektronik, dan parameter sterik dicari tingkat korelasinya terhadap aktivitas antikanker (Log IC₅₀ dengan metode backward. Selanjutnya dipilih tiga deskriptor dari data hasil model summary. Tingkat korelasi yang tinggi berarti mempunyai pengaruh yang besar terhadap aktivitas anti kanker (Log IC₅₀). Selanjutnya enam deskriptor terpilih dijadikan sebagai kombinasi untuk menghitung koefisien kolerasi terbaik (R) dengan mempertimbangkan $R > 0.7$ dengan metode enter. Selanjutnya dihitung Fhitung/Ftabel dengan Fhitung merupakan hasil df. Nilai Ftabel diperoleh dengan Ftabel = (Derajat Kebebasan, Jumlah Senyawa-df-1). Model persamaan terbaik dapat dicari pada B Unstandardized Coefficient.

2.2.8 Perhitungan q^2

Berdasarkan persamaan kombinasi dengan nilai R tertinggi. Selanjutnya dihitung nilai Log IC₅₀ prediksi terhadap nilai variabel penghasil R. Perhitungan Log IC₅₀ dilakukan untuk melihat perbandingan Log IC₅₀ eksperimen (nilai dari literatur) dan hasil dari uji penelitian yang telah dilakukan. Sebelum menghitung q^2 dibuat terlebih dahulu grafik hubungan Log IC₅₀ eksperimen dan Log IC₅₀ Prediksi. Lalu dilihat apakah ada senyawa yang menyimpang atau tidak, jika tidak ada maka tidak perlu membuang data outlier. Perhitungan data q^2 dilakukan pada SPSS dengan metode enter dan menghapus satu-persatu data yang ingin dicari. Hasil coefficient selanjutnya dimasukkan pada MS Excel lalu dihitung. Nilai q^2 yang memenuhi syarat yaitu $q^2 > 0.5$

2.2.9 Memodifikasi Senyawa Turunan 2- Aminochalcone

Senyawa turunan 2-aminochalcone dimodifikasi dengan menggantikan substituen NH₂ menjadi substituen ligan Cl (Klorida). Perolehan data sama saja seperti tahapan-tahapan di atas. Kemudian untuk mendapat nilai LogIC₅₀ senyawa modifikasi ini diperoleh berdasarkan

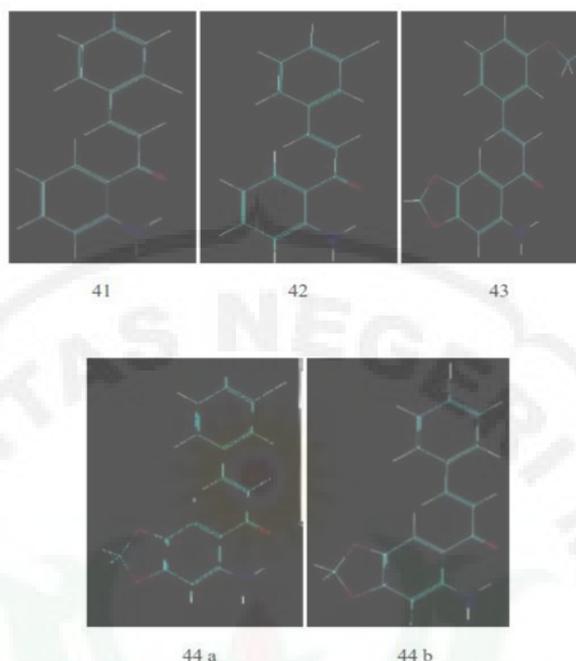
3. Hasil Dan Pembahasan

3.1 Hasil Pemodelan Struktur Senyawa

Berdasarkan literatur review molecules journal [3] diperoleh 5 senyawa turunan 2- aminochalcon. Masing-masing senyawa dibuat dalam model molekul dua dimensi pada software HyperChem. Model struktur awal dengan menggunakan sticks bertujuan untuk mempermudah dalam menggambar struktur. Pemodelan senyawa ini bertujuan agar dapat dilakukan perhitungan karakteristik kimia dan fisika yang merupakan parameter dari masing-masing senyawa tersebut sehingga diperoleh nilai deskriptor yang mencakup deskriptor hidrofobik, elektronik dan sterik.

3.2 Hasil Optimasi Geometri

Data yang terdapat dalam file rekaman adalah data-data energi dan muatan bersih atom. Data, luas permukaan, volume, Log P, refraktivitas molar, polarisabilitas molekular dan massa molekul dapat dilihat pada QSAR properties dari program Hyperchem. Pada data selanjutnya dilakukan compute-properties untuk menghitung nilai dipole moment. Sedangkan HOMO dan LUMO dapat dihitung pada compute-orbitals dengan standart 0 (nol) karena pada kestabilannya.



Gambar 2. Hasil struktur dari senyawa turunan 2-aminochalnone dalam bentuk 3D dan telah dioptimasi geometri menggunakan software hyperchem

3.3 Hasil dari Setiap Parameter

Muatan bersih atom dalam penelitian ini dipilih sebagai deskriptor elektronik dengan pertimbangan bahwa muatan maupun kerapatan elektron lokal sangat penting dalam penentuan berbagai reaksi kimia. Deskriptor berdasarkan muatan bersih atom dalam hal ini berguna untuk mengukur interaksi inter molekular. Muatan bersih atom dapat bernilai positif maupun negatif tergantung pada gugus yang terikat pada atom tersebut. Muatan bersih atom yang bernilai positif disebabkan oleh adanya gugus-gugus penarik elektron seperti metoksi, sehingga kerapatan elektron menjadi lebih kecil. Muatan atom yang bernilai negatif disebabkan karena adanya gugus-gugus metil, alkil, maupun atom halida. Gugus-gugus tersebut merupakan gugus penyumbang elektron, sehingga kerapatan elektron menjadi lebih besar [4].

Tabel 2. Hasil Perolehan Data HKSA

	HOMO	LUMO	E_ELE	T_ENER	F_ENER	LOG	HOF	MR	MD	SA	IC50	LOG
				GY	GY	P						IC50
41	-6.860174	3.741216	-569901. 213999	-92575. 8257361	-92575.8	1.52	-2679. 7455409	237.30	1.688	251.29	1.35	0.130334
42	-7.084722	3.627083	-622639. 7416164	-104051. 556447	-104052	0.38	-2749. 1880549	253.30	1.314	277.09	0.65	-0.18709
43	-5.68708	3.512726	-801127. 7759417	-130567. 351433	-130567	-1.42	-2412. 8929933	297.31	1.519	282.91	0.52	-0.284
44 a	-5.39529	3.747367	-756353. 2853236	-130757. 600198	-130758	-1.03	-2101. 2420031	285.27	1.723	244.00	1.50	0.176091
44 b	-5.69013	3.74697	-741955. 1279656	-130797. 959032	-130798	-1.03	-2141. 6008368	285.27	1.358	258.30	3.10	0.491362

Beberapa data yang ditampilkan pada Tabel 2 merupakan hasil data perolehan HKSA seperti HOMO, LUMO, Energy Elctronik, Total Energy, Free Energy, Log P, Heat of Formation, Mass, Moment Dipole, SAA (Surface Area Approx), dan IC₅₀. Surface Area merupakan perkiraan luas permukaan yang

dilihat dari domain. Log P (logaritma koefisien partisi n- oktanol/air) menyatakan semakin besar Log P maka lebih toksik, hal ini dikarenakan apabila Log P semakin besar maka akan mempertinggi kelarutannya dalam lemak, dengan semakin tingginya kelarutan pada lemak akan lebih mudah diabsorpsi pada saluran pencernaan untuk masuk ke sistemik dan masuk pada sel. Mass menyatakan berat atau bobot dari suatu molekul/senyawa. IC₅₀ merupakan konsentrasi yang dapat merendam 50% radikal bebas DPPH. Semakin kecil nilai IC₅₀ maka aktivitas antioksidannya lebih besar.

3.4 Perhitungan Log IC₅₀ Eksperimen

Hasil dari perhitungan Log IC₅₀ eksperimen dapat dilihat pada tabel berikut.

Tabel 3. Hasil Validasi Log IC₅₀

Senyawa	Log IC ₅₀	Log IC ₅₀
	Eksperimen	Prediksi
41	0.13033377	0.163086208
42	-0.187086643	0.026073529
43	-0.283996656	-0.194512662
44 a	0.176091259	0.408916821
44 b	0.491361694	0.54818611

Aktivitas prediksi Log IC₅₀ prediksi terkecil yaitu -0.194512662 dengan perbandingan Log IC₅₀ eksperimen sebesar 0.283996656.

3.5 Uji Kolerasi

Tabel 4. Hasil Model Summary

Model	R	R	Adjusted R	Standard Error of
		Square	Square	The Estimate
1	.956 ^a	0.837	0.658	.11661758

a. Predictors : MR, MD, LUMO, Log P

Calon deskriptor yaitu Mass, Moment Dipole, LUMO, dan LOG P.

Tabel 5. Hasil Kombinasi Deskriptor

NO	Kombinasi	R
1	MR, MD, LUMO	0,956
2	MD, LUMO, LOGP	0,946
3	LUMO,LOGP,MR	0,932
4	LOGP,MR, MD	0,188

Analisis korelasi dilakukan untuk mengetahui derajat hubungan linier antara aktivitas antikanker Log IC₅₀ senyawa 2-aminochalcone dan turunannya dengan 4 buah deskriptor. Analisis korelasi dilakukan dengan metode two-tailed dan koefisien korelasi Pearson. Hasil analisis korelasi digunakan untuk memilih deskriptor sebagai variabel bebas dalam perhitungan analisis statistik MLR. Hal ini dikarenakan analisis statistik MLR menggunakan metode backward hanya membutuhkan n-2 variabel bebas dimana merupakan jumlah data fitting yang digunakan.

Hasil analisis regresi linear ditunjukkan pada Tabel 3. Calon deskriptor pada model summary menunjukkan nilai R diatas 0.7. Pada tahap ini didapatkan nilai R pada masing masing persamaan untuk kombinasi descriptor yang paling baik ditunjukkan pada persamaan 1 dengan jumlah descriptor yang dipilih sebanyak 3 descriptor dengan R = 0.956 kriteria dari persamaan regresi adalah R harus > 0.9 akan semakin baik bila nilai R semakin mendekati 1.

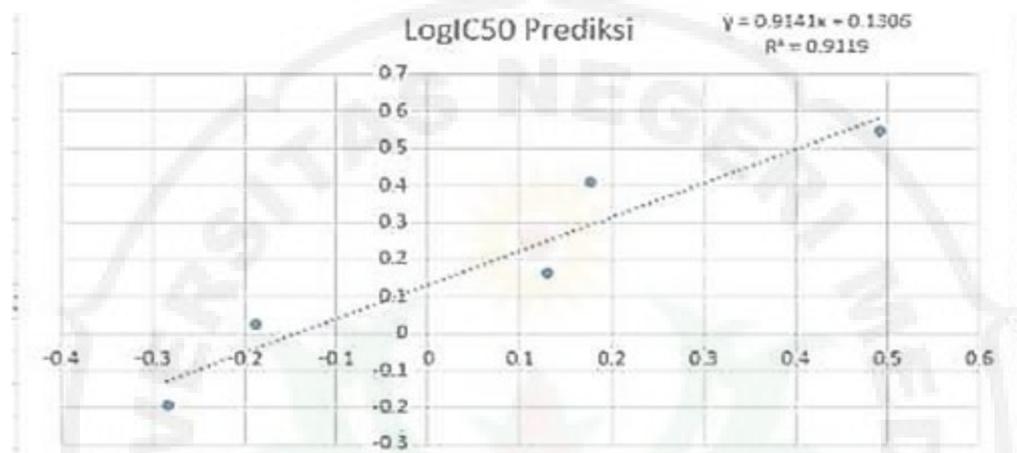
Rumus HKSA yang didapat yaitu :

$$\text{Log IC}_{50} = -12.207 + (0.005 \cdot \text{nilai MR}) - (0.385 \cdot \text{nilai MD}) + (3.163 \cdot \text{nilai LUMO})$$

Selanjutnya dihitung hasil Fhitung yang merupakan df yaitu 3.511. Dimana Ftabel dihitung menggunakan excel $F_{tabel} = (0.05; 3; 5-3-1) = 215.7073$
Maka, $F_{hitung}/F_{tabel} = 3.511/215.7073 = 0.016276683$

3.6 Perhitungan q^2

Hasil grafik dari hubungan Log IC₅₀ Eksperimen dengan Log IC₅₀ prediksi (gambar 4) menunjukkan bahwa tidak terdapat data senyawa yang menyimpang dari garis regresi linear dikarenakan nilai R^2 nya >0.7, sehingga tidak ada pembuangan data outlier. Maka hasil R^2 pada gambar dibawah ini yaitu 0.9119.

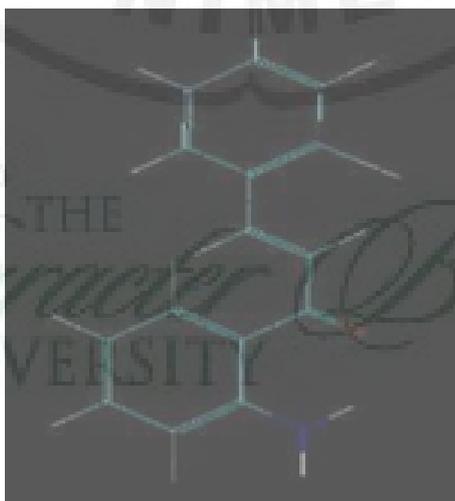


Gambar 3. Hasil regresi linear

Perhitungan data q^2 dilakukan pada SPSS dengan metode enter dan menghapus satu-persatu data yang ingin dicari. Hasil coefficient selanjutnya dimasukkan pada MS Excel lalu dihitung. Nilai q^2 yang memenuhi syarat yaitu $q^2 > 0.5$. Hasil q^2 yang didapat dari data excel yaitu -2.03606.

3.7 Modifikasi Senyawa Turunan 2- Amino-chalcone

Senyawa yang dimodifikasi pada penelitian ini yaitu dengan menggantikan substituen NH₂ menjadi substituen ligan Cl (Klorida). Perlakuan dalam menghasilkan data parameter hidrofobik, sterik dan elektronik (variabel independen) serta data IC₅₀ ataupun Log IC₅₀ pada penambahan substituen Cl terhadap senyawa amino-chalcone sama dengan perlakuan pada penambahan substituen Cl terhadap senyawa 2- amino-chalcone.



Gambar 4. Senyawa 2-aminochalcone yang dimodifikasi dengan ligan Cl

Tabel 6. Senyawa prediksi dengan aktivitas yang lebih baik dari senyawa sebelumnya

Senyawa Turunan	Konstanta	Deskriptor						Log IC50	IC50
		MR		MD		LUMO			
		Koef	Nilai	Koef	Nilai	Koef	Nilai		
Acuan								-0.194512662	0.63898
41 Cl	-12.207	0.005	257.72	0.385	3.658	3.163	3.684357	2.143551191	139.1718
42 Cl	-12.207	0.005	257.72	0.385	3.281	3.163	3.409502	1.129039826	13.45984
43 Cl	-12.207	0.005	301.73	0.385	3.569	3.163	3.312605	1.153484615	14.23917
44 a Cl	-12.207	0.005	301.73	0.385	2.896	3.163	3.605976	1.822312088	66.42202
44 b Cl	-12.207	0.005	301.73	0.385	2.595	3.163	3.474317	1.289989671	19.49798

4. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang dibahas sebelumnya, didapatkan persamaan HKSA dengan nilai R terbaik (0.956), yaitu : $\text{Log IC}_{50} = -12.207 + (0.005 \cdot \text{nilai MR}) - (0.385 \cdot \text{nilai MD}) + (3.163 \cdot \text{nilai LUMO})$. Dan juga didapat nilai q^2 pada senyawa 2-aminochalcone yaitu sebesar -2.03606. Senyawa 2-aminochalcone yang dimodifikasi menggunakan substituen Cl dimana nilai $\text{IC}_{50} = 0.63898$ dan nilai $\text{Log IC}_{50} \text{ Prediksi} = -0.194512662$. Hasil nilai IC_{50} merupakan nilai yang kuat dan baik dikarenakan nilainya lebih rendah dibanding nilai IC_{50} awal.

Daftar Pustaka

- [1] Faiza,S., Rahman,S., dan Asri,A.,(2016). Karakteristik Klinis dan Patologis Karsinoma Nasofaring di Bagian THT-KL RSUP Dr. M. Djamil Padang. *Jurnal Kesehatan Andalas*. 5(1).90-96
- [2] Utomo,B,S., Sanubari,F., Utami,B., dan Nurhayati,N. (2017). Analisis Hubungan KuantitatifStruktur Dan Aktivitas Analgesik Senyawa Turunan Meperidin Menggunakan Metode Semiempiris AM1. *Jurnal Kimia Dan Pendidikan Kimia*. 2(3).158-168.
- [3] Irfan,R., Shikufa,M., Meshari,A., and Rahman, S, Z, S. (2020). A Comprehensive Review of Aminochalcones. *Molecules Journal. Review Journal*. 1-76. Doi : <http://dx.doi.org/10.3390/molecules25225>
- [4] Vaulina E, Mochammad, Abdulghani. (2012). Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas(Hksa) Antikanker Senyawa Turunan Kalanon Dengan Metode. *Jurnal Nasional*. 7(2) : 130–142