



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 (1QKM) Sebagai Antikanker Payudara</i> Cindy Agnesia dan Destria Roza .....	404-407
<i>Uji Docking Senyawa Alkaloid Quinolizidine dan Analognya Sebagai Inhibitor Reseptor Estrogen pada Kanker Payudara</i> Indira Aviza, Anggita Leontin Sitorus, Destria Roza .....	408-415
<i>Uji Docking Senyawa Alkaloid Piperidine dan Analognya Sebagai Inhibitor Reseptor Estrogen pada Kanker Payudara</i> Anggita Leontin Sitorus, Indira Aviza, Destria Roza .....	416-423
<i>Studi Docking Molekuler Senyawa Turunan Kurkuminoid Pada Kunyit (Curcuma longa Linn.) Sebagai Inhibitor Protein Kinase Mek1 Sel Kanker Otak Dengan Autodock</i> Vina Nadia Agnes Cantika Nadeak dan Destria Roza .....	424-430
<i>Docking Ligan Anti Kanker Prostat dengan Ligan Pembanding Senyawa Turunan Asam Galat Menggunakan Autodock 4.2 dan Discovery Studio</i> Astri Devi Br Pakpahan dan Destria Roza .....	431-439
<i>Docking Molekuler Potensi Senyawa 2,6-Dimethylocta-3,5,7-Trien-2-Ol Terhadap Senyawa 4l10 Anti Kanker Paru</i> Yohansen Wahyudi dan Destria Roza .....	440-444
<i>Docking Molekuler Potensi Antikanker Payudara Protein Iyc4 Dari Senyawa Turunan Kuersetin</i> Depi Irnasari Sipahutar dan Destria Roza .....	445-449







## Docking Molekular Potensi Antikanker Payudara Protein3ert Dengan Senyawa Turunan Kuinin

Ruth Yohana Saragih<sup>1\*</sup>, Nurul Hidayah<sup>1</sup>, Destria Roza<sup>1</sup>

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

\*Email korespondensi: [ruthyohanasaragih@gmail.com](mailto:ruthyohanasaragih@gmail.com)

### Abstrak

Estrogen- $\alpha$  (ER- $\alpha$ ) merupakan target utama pada terapi kanker payudara jenis ER+. Inhibisi pada ER- $\alpha$  diketahui dapat memperlambat proliferasi sel kanker payudara ER+. Reseptor ER- $\alpha$  yang digunakan adalah 4- hidroksitamoksifen sebagai ligan co-crystal (PDB ID 3ERT). Senyawa turunan kuinin diketahui memiliki aktivitas antikanker dengan menghambat beberapa jenis reseptor. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui peran kuinin sebagai antikanker ligan 3ERT (Human Estrogen Receptor Alpha Ligan-Binding Domain In Complex With 4-Hidroxytamoxifen) dengan aplikasi autodock vina, discovery studio dan pymol. Metode yang dilakukan adalah semua ligan dilakukan docking molecular menggunakan program AutoDock Vina. Hasil yang diperoleh berupa nilai RMSD 1,33 ligan terhadap protein dan memvisualisasikan konformasi 2D diagram dan interaksi ligan-protein. Berdasarkan molekular docking maka kuinin memiliki potensi aktivitas sebagai antikanker payudara karena memiliki binding energy (-8.04 kkal/mol), konstanta inhibisi ( 1.27  $\mu$ M), dan membentuk ikatan konvensional hidrogen pada asam amino LEUA:346 dan dapat dilanjutkan uji aktivitas secara in vitro di laboratorium untuk mendapatkan hasil sebagai antikanker.

**Kata kunci :** antikanker, molecular docking, kuinin

### Abstract

*Estrogen- $\alpha$  (ER- $\alpha$ ) is the main target in the treatment of ER+ breast cancer. Inhibition of ER- $\alpha$  can slow the proliferation of ER+ breast cancer cells. The ER- $\alpha$  receptor used was 4-hydroxytamoxifen as co-crystal ligand (PDB ID 3ERT). Quinine-derived compounds are known to have anticancer activity by inhibiting several types of receptors. This study aims to determine the role of quinine as an anticancer ligand 3ERT (Human Estrogen Receptor Alpha Ligand-Binding Domain In Complex With 4-Hydroxytamoxifen) with the application of autodock vina, discovery studio and pymol. The method used is that all ligands are molecularly docked using the AutoDock Vina program. The results obtained in the form of an RMSD value of 1.33 ligands for proteins and visualized 2D conformation diagrams and ligand-protein interactions. Based on molecular docking, quinine has potential activity as an anticancer breast because it has binding energy (-8.04 kcal/mol), due to inhibition (1.27 M), and the conventional hydrogen constant in the amino acid LEUA:346 and can be continued in vitro activity in the laboratory for get results as anticancer.*

**Keywords:** anticancer, molecular docking, quinine

### 1. Pendahuluan

Kuinin merupakan senyawa aktif yang terkandung dalam kulit batang tanaman kina dengan presentase cukup besar, memiliki rumus molekul (C<sub>20</sub>H<sub>24</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>). Kuinin digunakan sebagai obat antimalaria, terutama untuk mengobati infeksi yang disebabkan oleh malaria *Plasmodium falciparum*. Kuinin bertindak sebagai skizontisida darah meskipun juga memiliki aktivitas gametocytocidal terhadap *P.vivax* dan *P. malariae*. Mekanisme aksi senyawa kuinin antara lain; pengurangan asupan oksigen dan metabolisme karbohidrat; gangguan replikasi DNA; pengurangan rangsangan serat otot melalui perubahan distribusi kalsium, penghambatan P-glikoprotein yang diekspresikan berlebihan pada tumor yang resistan terhadap beberapa obat dan dapat meningkatkan efikasi beberapa agen antineoplastik. Kuinin juga ditemukan memiliki antilipidperoksidase, efek antioksidan pada sel kanker dan dapat menghambat kanker payudara, kolon, dan ginjal [1]. Kanker merupakan penyakit yang menempati peringkat kedua sebagai penyebab kematian. Hal ini menyebabkan pengembangan penelitian untuk menemukan obat-obat baru terus dikembangkan, bahkan dari bahan alam [2]. Obat antikanker adalah senyawa kemoterapeutik yang digunakan untuk pengobatan tumor yang membahayakan kehidupan (kanker). Obat antikanker disebut juga obat sitotoksik, sitostatik atau senyawa anti neoplasma [3].

Docking molekular merupakan metode komputasi untuk memprediksi apakah senyawa tersebut mempunyai aktifitas sebelum diujikan. Percobaan dengan docking molekular ini untuk melihat potensi kuinin sebagai antikanker melalui aktifitas dalam menghambat Human Estrogen Receptor Alpha Ligan-Binding Domain In Complex With 4-Hidroxytamoxifen. Molecular docking dapat dilakukan dengan banyak software yang dapat di download dengan gratis. Penelitian ini menggunakan perangkat lunak *AutoDock 4.2*, *Biovia Discovery Studio Visualizer*, dan *Pymol* [4].

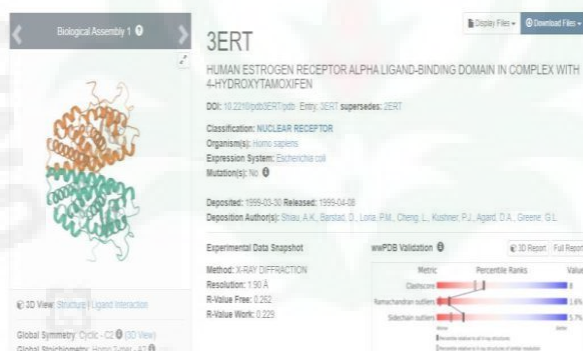
## 2. Metode Penelitian

### 2.1 Alat

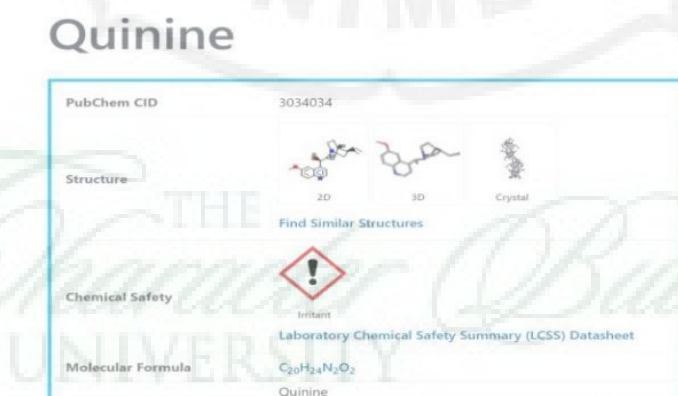
Perangkat keras yang digunakan yaitu Laptop Hp dengan spesifikasi Windows 1064 bit dan perangkat lunak yang digunakan adalah *AutoDock 4.2*, *Biovia Discovery Studio Visualizer*, *Pymol*, dan *Autodock Vina*.

### 2.2 Subjek Penelitian

Protein target yang digunakan dapat diunduh dari [www.pdb.org](http://www.pdb.org) dengan X-Ray diffraction resolusi pengukuran adalah 1,90 Å yang disajikan pada (Gambar 1) dengan PDB ID: ERT. Ligan yang digunakan adalah kuinin senyawa antikanker yang telah dipersiapkan dan dilakukan preparasi dengan reseptor. Ligan pembanding kuinin di download di pubchem dengan formula kimia C<sub>20</sub>H<sub>24</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (Gambar 2).



Gambar 1. [www.pdb.org](http://www.pdb.org) untuk mencari struktur



Gambar 2. [pubchem.ncbi.nlm.nih.gov](http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov)

## 2.3 Prosedur Penelitian

### 2.3.1 Preparasi protein dan ligan

Perangkat digunakan untuk memisahkan *native ligand* dari protein sehingga memperoleh berkas *native ligand*, protein tanpa ligan dengan mengabaikan keberadaan air dalam ekstensi pdb. Protein dan ligan dipersiapkan untuk menjadi berkas siap pakai berekstensi pdb dengan program *Discovery Studio*. Pemisahan ligan alami dengan



makromolekul dilakukan pada aplikasi *Discovery Studio*. Sedangkan untuk ligan pembeding di ekstrak di aplikasi *pymol* setelah itu di preparasi di *Autodock Tools*.

### 2.3.2 Validasi Metode Docking

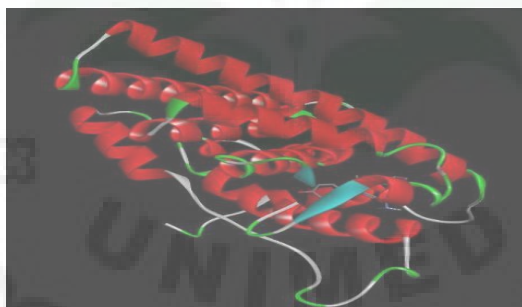
Docking molekular terhadap ligan natif dilakukan untuk mencari konformasi 3D *native ligand* terhadap reseptor dengan memperhatikan koordinat pusat dan besaran *gridbox* dari *binding site pocket* dalam satuan angstrom (Vina) atau *number of points* (AutoDock). Konformasi hasil docking yang diperoleh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

### 2.3.3 Docking Molekular dan Analisis Data

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

## 3. Hasil dan Pembahasan

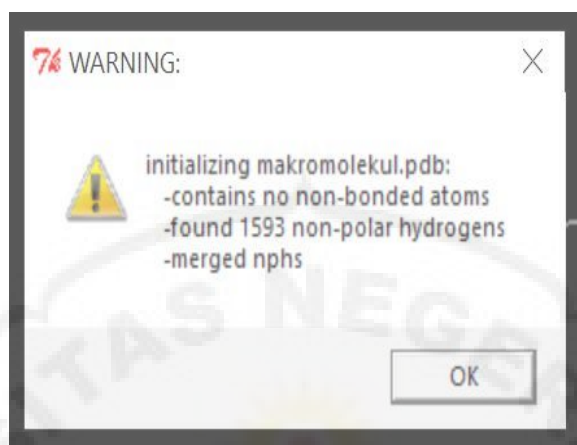
Ligan dan protein yang telah diunduh dipreparasi sehingga diperoleh protein tanpa ligan dan air dengan perangkat lunak *Discovery Studio*. Berkas protein dipreparasi dengan program *Autodock* untuk menambah ikatan hidrogen polar kemudian di merge lalu diikat dengan ligan dan selanjutnya dipersiapkan untuk dimasukkan kedalam *grid box*. Validasi dengan menggunakan *gridbox* antara ligan dan protein dilakukan setiap *algoritma docking*. Proses docking perlu membuat *gridbox* untuk menentukan nilai koordinat pusat serta besaran *gridbox* tempat interaksi ligan dan protein, sehingga *gridbox* harus menutupi semua ligan dan reseptor. Data docking kemudian disajikan dalam berkas *config.txt*. Nilai dimensi dan pusat massa diperoleh dari hasil pembuatan *gridbox* yang dioptimasi. Ligan atau senyawa uji dalam penelitian ini berupa senyawa *kuinin* dengan reseptor *3ERT* (Human Estrogen Receptor Alpha Ligan-Binding Domain In Complex With 4-Hidroxytamoxifen) (Gambar 3), (Gambar 4), (Gambar 5) dan (Gambar 6).



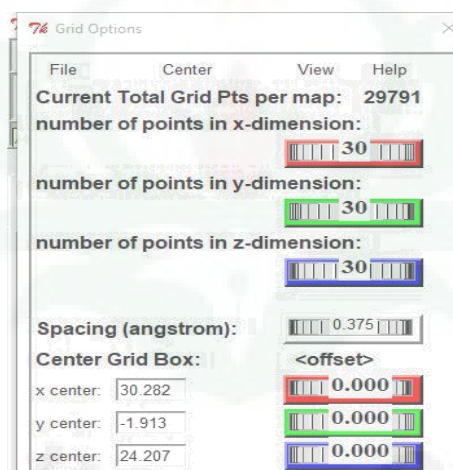
Gambar 3. Makromolekul



Gambar 4. Preparasi makromolekul dengan menambah hydrogen

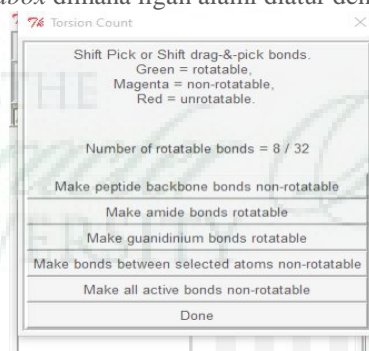


Gambar 5. Inisiasi makromolekul



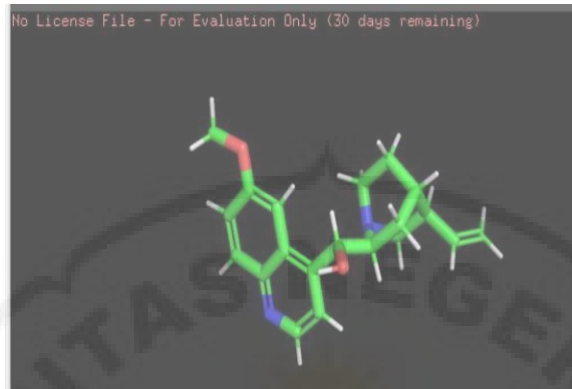
Gambar 6. Grid options pada gridbox ligan alami

Pada ligan alami tersebut terdapat 18 cincin karbon aromatic dan 8 ikatan rotatable. Terdapat rotatable berwarna *green*, non rotatable berwarna *magenta* dan unrotatable berwarna *red* dengan number rotatable bonds 8/32 (Gambar 7). Pada pengaturan *gridbox* dimana ligan alami diatur dengan x,y,z dimension sebesar 30.



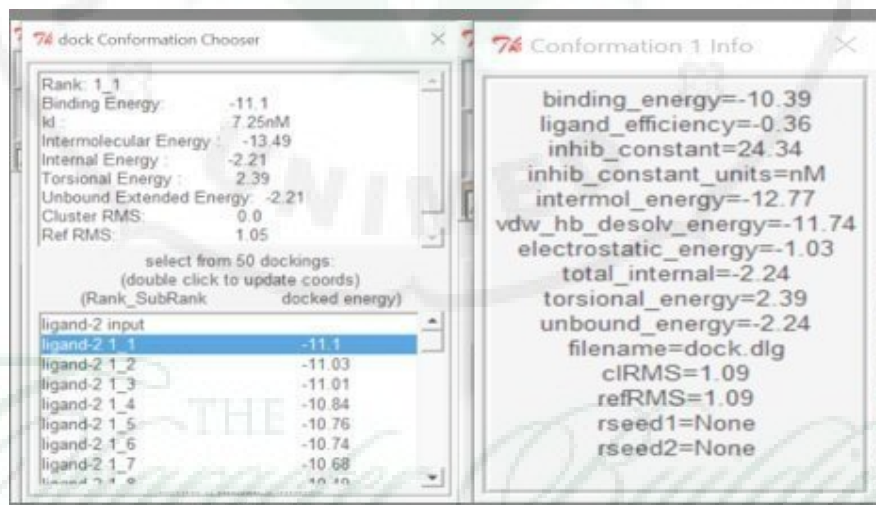
Gambar 7. Torsion count pada ligan alami

Selanjutnya senyawa kuinin yang diekstrak di aplikasi Pymol dan di preparasi di autodock tools. Didapat pada ligan pembanding kuinin ini 9 cincin karbon aromatic, 23 atom hidrogen non polar, dan 5 ikatan rotatable. Terdapat rotatable berwarna *green*, non rotatable berwarna *magenta* dan unrotatable berwarna *red* dengan number rotatable bonds 5/32. Pada pengaturan *gridbox* dimana ligan pembanding diatur dengan x,y,z dimension sama dengan ligan alami.



Gambar 8. Ekstraksi ligan pembanding menggunakan aplikasi pymol

Dan kemudian pada proses *successfull running* autogrid dan autodock didapatkan hasil validasi docking molecular dan analisis data pada ligan alami. Sistem docking untuk pusat massa dan besaran volume *gridbox* sudah sesuai. Penambatan antara ligan dengan reseptor diketahui kekuatannya dari bentuk ligan yang mempunyai energi terkecil. *Binding affinity* adalah nilai yang menunjukkan kemampuan ligan berikatan dengan reseptor. Jika semakin besar nilai afinitas ikatan, maka afinitas antara reseptor dengan ligan akan semakin rendah. Semakin kecil nilai afinitas binding, maka afinitas antara reseptor dengan ligan semakin tinggi. Didapat RMSD untuk ligan alami sebesar 1,09. Analisis hasil docking ligan alami dengan binding energi sebesar -11,1,  $kI = 7,25 \mu\text{m}$  dan intermolecular energy sebesar -13,49. Sedangkan analisis hasil docking ligan pembanding dengan RMSD 1.33 dengan binding energy sebesar -8.04,  $kI = 1.27 \mu\text{m}$  dan intermolecular energi sebesar -9.53. Hasil binding energy minus ini menunjukkan hasil yang baik dan RMSD yang kurang dari 2 menunjukkan hasil yang baik (Gambar 9 dan 10).

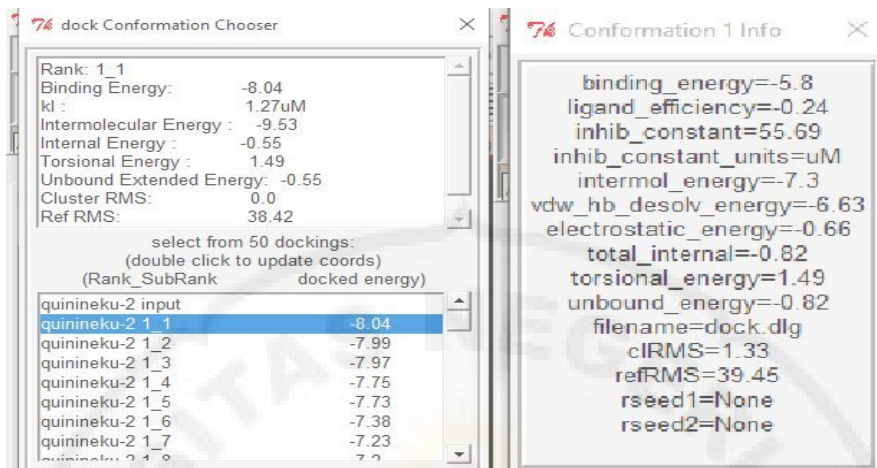


Rank	SubRank	docked energy
ligand-2	input	
ligand-2	1_1	-11.1
ligand-2	1_2	-11.03
ligand-2	1_3	-11.01
ligand-2	1_4	-10.84
ligand-2	1_5	-10.76
ligand-2	1_6	-10.74
ligand-2	1_7	-10.68
ligand-2	1_8	-10.49

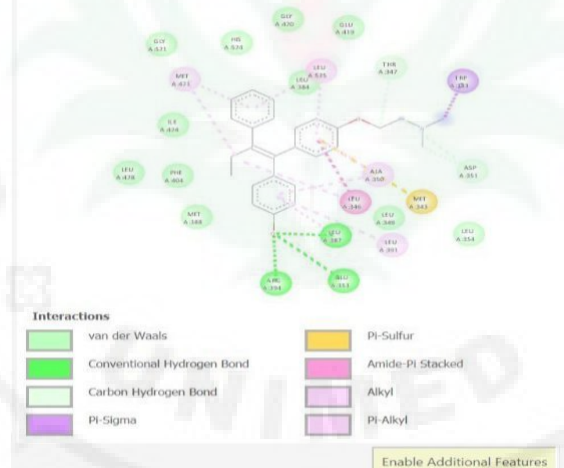
binding_energy=-10.39
ligand_efficiency=-0.36
inhib_constant=24.34
inhib_constant_units=nM
intermol_energy=-12.77
vdw_hb_desolv_energy=-11.74
electrostatic_energy=-1.03
total_internal=-2.24
torsional_energy=2.39
unbound_energy=-2.24
filename=dock.dlg
cIRMS=1.09
refRMS=1.09
rseed1=None
rseed2=None

Gambar 9. Hasil Analisis Ligan Alami

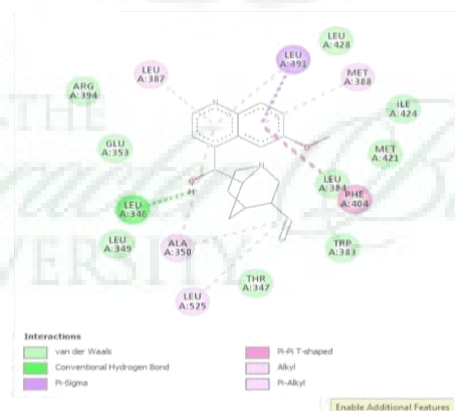


Gambar 10. Hasil Analisis Ligan Pemanding

Hasil 2D diagram interaksi makromolekul dengan ligan alami, dan 2D interaksi makromolekul dengan ligan pemanding seperti ditunjukkan pada (Gambar 11 dan 12). Dimana adanya ketersamaan ikatan Van Der Waals, ikatan konvensional hidrogen, dan Pi-sigma dari ligan alami dan ligan pemanding.



Gambar 11. Ligan alami



Gambar 12. Ligan kuinin

Simulasi dilakukan dengan menambatkan ligan ke sisi aktif pengikatan protein yang diketahui dengan Discovery Studio Daerah pengikatan ligan alami tersebut adalah (GLU419, GLY420, GLY521, HIS524, LEU384, ILE424, LEU428, PHE404, MET388, LEU349, LEU354, THR347, ASP351, MET421, LEU525, ALA350, LEU391, LEU346, LEU387, GLU353, ARG394, TRP383, MET343). Terdapat interaksi yang terjadi antara kuinin



dengan protein 3ERT yaitu interaksi hydrogen. Interaksi hidrogen adalah interaksi yang terjadi antara atom hidrogen yang berikatan secara kovalen dengan atom elektronegatif donor dengan atom elektronegatif lainnya yang bersifat sebagai reseptor. Ikatan hidrogen antara asam amino dan ligan menunjukkan interaksi molekular yang spesifik Pada senyawa kuinin terjadi 1 interaksi hidrogen dan 15 interaksi hidrofobik. Pada penambatan terarah kuinin terdapat 1 ikatan hidrogen pada asam amino LEU346. Situs interaksi kuinin memiliki kesamaan sebanyak 15 asam amino, yaitu LEU346, LEU428, LEU391, ARG394, MET421, ILE424, LEU387, GLU353, LEU525, ALA350, THR347, LEU384, TRP383, ILE424, LEU349. Kesamaan ini mengindikasikan kemiripan mekanisme aksinya terhadap protein 3ERT.

#### 4. Kesimpulan

Simpulan dari penelitian ini adalah berdasarkan molekular docking maka kuinin memiliki potensi aktivitas sebagai antikanker karena memiliki afinitas dan membentuk ikatan hydrogen dan dapat dilanjutkan uji aktivitas secara in vitro di laboratorium untuk mendapatkan hasil sebagai antikanker.

#### Daftar Pustaka

- [1] Ernawati, T., dkk. 2018. Bioaktivitas Senyawa Turunan Alkaloid Kinkona. *Jurnal Agrosains dan Teknologi*. **3:2** 1-10
- [2] Herlina, T., dkk. 2012. Senyawa Aktif Antikanker Payudara dan Antimalaria Dari Tumbuhan Dadap Ayam (*Erythrina variegata*) Secara In Vitro (Anti Breast-Cancer and Anti-malarial Active Compounds Of *Erythrina variegata* By In Vitro Test). *Jurnal Manusia dan Lingkungan*. **19:1** 30-36
- [3] Pratama, F. E. 2018. Senyawa Aktif Antikanker Dari Bahan Alam dan Aktivasnya. *Jurnal Farmaka*. **16:1** 149-158
- [4] Pratama, M. R. F. 2016. Studi Docking Molekular Senyawa Turunan Kuinolin Terhadap Reseptor Estrogen- $\alpha$ . *Jurnal Surya Medika*. **2:1** 1-7

UNIMED

THE  
Character Building  
UNIVERSITY