

BAB IV. ALAT DAN BAHAN

IV.1. Alat

IV.1.1. Perangkat Keras

Alat yang digunakan pada penelitian ini yaitu perangkat keras satu unit komputer Xeon dengan spesifikasi sistem operasi *Linux Ubuntu 18.04 64-bit*, processor *Intel XEON CPU E5-2670 v2 @2.50 GHz 20 core-40 Threadhs*, OS *Windows 10 pro 64 bit*, 32 GB of *Random Access Memory gtx 970*.

IV.1.2. Perangkat Lunak

Dalam penelitian ini menggunakan perangkat lunak *AutoDock* versi 4.2.6, *AMBER* 18, *ChemBio Office* 2010, *Discovery Studio Visualizer* 2016, *Gaussian* 09, *GaussView* 5.0.8.

IV.2. Bahan

Makromolekul

Bahan yang digunakan pada penelitian ini adalah struktur target yaitu enzim *nadh-dependent enoyl acp reductase (InhA)* yang diperoleh dari website *Protein Data Bank* www.rcsb.org dalam bentuk file *Protein Data Bank* (*.pdb) dengan kode 2AQ8. Struktur ligan uji yaitu senyawa aktif dari kulit buah naga (*Hylocereus polyrhizus*) berjumlah 29 senyawa uji, juga dengan ligan pembanding yaitu *InhA* digambar dalam bentuk 2D dan 3D yang kemudian disimpan dalam bentuk file (*.cdx) dan (*.pdb), selanjutnya disimpan dalam bentuk file (*.mol).

Tabel IV.1. Senyawa Uji Kulit Buah Naga

No	Senyawa Uji Kulit Buah Naga
1	<i>Phthalic acid, 6-ethyloct-3-yl 2-ethylhexyl ester</i>
2	<i>1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono (2-ethylhexyl) ester</i>
3	<i>Campesterol</i>
4	<i>Stigmasterol</i>
5	<i>b-Sitosterol</i>
6	<i>Stigmast-4-en-3-one</i>

7	<i>Ergosta-4,6,8(14),22-tetraen-3-one</i>
8	<i>α-Amyrin</i>
9	<i>β-Amyrin</i>
10	<i>Palmitic acid</i>
11	<i>Oleic acid</i>
12	<i>Linoleic acid</i>
13	<i>2-Chloroethyl linoleate</i>
14	<i>1-Nonadecene</i>
15	<i>17-Pentatriacontene</i>
16	<i>Octacosane</i>
17	<i>Eicosane</i>
18	<i>Tetratriacontane</i>
19	<i>1-Tetracosanol</i>
20	<i>Heptacosane</i>
21	<i>11-Hexacosyne</i>
22	<i>Octadecanal</i>
23	<i>Nonacosane</i>
24	<i>Octadecane</i>
25	<i>Docosane</i>
26	<i>Squalene</i>
27	<i>Trichloroacetic acid, hexadecyl ester</i>
28	<i>Hexadecyl oxirane</i>
29	<i>6-Tetradecanesulfonic acid, butyl ester</i>