

### BAB III. METODOLOGI PENELITIAN

Metodologi yang digunakan pada penelitian ini meliputi metode penambatan molekul, dan simulasi dinamika molekul. Tahapannya antara lain persiapan ligan, persiapan reseptor, validasi metode penambatan molekul, penambatan molekul struktur senyawa uji dengan protein target, simulasi dinamika molekul dan interpretasi hasil.

Persiapan ligan uji yaitu struktur enyawa asam lemak tak jenuh dari *navicula salinicola* diunduh dari [www.zinc.docking.org](http://www.zinc.docking.org) struktur senyawa 2D dan 3D. Persiapan protein target yaitu protein *spike* yang diunduh dari [www.rscb.org](http://www.rscb.org) dengan kode PDB ID 7CN8.

Validasi metode penambatan molekul antara protein *spike* dengan ligan alami menggunakan aplikasi Autodock versi 4.2.3. Interpretasi hasil dilihat dari nilai RMSD, dikatakan valid jika nilai  $\text{RMSD} \leq 2 \text{ \AA}$ . Selanjutnya dilakukan penambatan molekul antara ligan uji terhadap protein *spike* menggunakan aplikasi Autodock versi 4.2.3 dengan parameter yang sudah tervalidasi, kemudian dilakukan interpretasi hasil antara lain nilai  $\Delta G$  (energi bebas ikatan), nilai  $K_i$  (konstanta inhibisi), dan interaksi ikatan yang terbentuk antara ligan uji dengan protein target.

Senyawa terbaik hasil penambatan molekul digunakan untuk simulasi dinamika molekul menggunakan aplikasi AMBER versi 18 untuk melihat kestabilan afinitas reseptor dan ligan meliputi tahapan minimisasi, pemanasan dengan suhu  $310^\circ\text{K}$  dan produksi selama 50 ns yang mensimulasikan pada keadaan yang mendekati fisiologis tubuh manusia, kemudian dilakukan interpretasi hasil antara lain RMSD, RMSF dan MMGBSA.