

ABSTRAK**KAJIAN PENAMBATAN MOLEKUL DAN DINAMIKA MOLEKUL
SENYAWA ASAM LEMAK TAK JENUH DARI *NAVICULA SALINICOLA*
TERHADAP TARGET PROTEIN *SPIKE* DARI SARS-COV-2**

**Oleh :
Yayan Pratama
11181146**

SARS-CoV-2 merupakan virus korona penyebab sindrom pernafasan akut berat. Sampai sekarang, belum atau sedikit obat yang tersedia untuk mengendalikan virus ini. Protein *spike* berperan penting dalam proses infeksi di dalam tubuh manusia sehingga menjadi jalur untuk mengintervensi infeksi dari virus ini. *Navicula sp* memiliki kandungan PUFA dimana secara struktur mirip dengan omega 3 yang telah dilaporkan mampu mengikat protein *spike* SARS-CoV-2 sehingga menghalangi interaksinya dengan ACE2. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi interaksi, afinitas dan kestabilan antara asam lemak tak jenuh pada *Navicula salinicola* dengan protein *spike* yang ditemukan pada SARS-CoV-2. Pendekatan digunakan secara *in silico* melalui metode penambatan molekul menggunakan AutoDock 4.2, dilanjutkan dengan metode simulasi dinamika molekul menggunakan AMBER 18. Simulasi penambatan molekul dengan 15 senyawa uji dilakukan setelah diperoleh lokasi penambatan yang valid dan diperoleh dua senyawa yaitu DHA dan EPA dengan nilai ΔG berturut-turut -8,44 dan -7,67; kkal/mol. Simulasi dinamika molekul menunjukkan kedua ligan ini mampu menstabilkan kompleks selama 50 ns tetapi ligan EPA memiliki energi MMGBSA ($\Delta G = 52,1365$ kkal/mol) lebih negatif dari ligan alami dan DHA. molekul untuk senyawa (DHA dan EPA) menunjukkan kestabilan dicapai pada waktu 50 ns dengan nilai energi bebas ikatan MMGBSA adalah -46,39; -49,69 kkal/mol. senyawa eicosapentaenoic acid (EPA) berpotensi menjadi senyawa pemandu untuk menginhibisi reseptor ace2.

Kata Kunci : SARS-CoV-2, PUFA, Penambatan molekul, Dinamika molekul, Protein *spike*, *Navicula salinicola*

ABSTRACT**STUDY OF MOLECULE DOCKING AND MOLECULE DYNAMICS OF UNSATURATED FATTY ACIDS FROM NAVICULA SALINICOLA ON SPIKE OF PROTEIN TARGET FROM SARS-COV-2**

By:

Yayan Pratama

11181146

SARS-CoV-2 is a coronavirus that causes severe acute respiratory syndrome. Until now, no or few drugs are available to control this virus. The spike protein plays an important role in the infection process in the human body so that it becomes a pathway to intervene in infection with this virus. Navicula sp contains PUFA which is structurally similar to omega 3 which is reported to be able to bind to the SARS-CoV-2 spike protein so as to prevent its interaction with ACE2. This study aims to identify the interaction, affinity, and stability between the unsaturated fatty acids in Navicula salinicola and the spike protein found in SARS-CoV-2. An in silico approach using the molecular anchoring method using AutoDock 4.2, followed by a molecular dynamics simulation method using AMBER 18. Molecular anchoring simulations with 15 test compounds were carried out after obtaining a valid anchoring location and obtaining two compounds, namely DHA and EPA with G values respectively. follow -8.44 and -7.67; kcal/mole. Molecular dynamics simulations of these two ligands were able to prove more complex for 50 ns but the EPA ligand had a negative MMGBSA ($\Delta G = 52.1365$ kcal/mol) energy than the natural ligand and DHA. the molecules for compounds (DHA and EPA) showed stability was achieved at 50 ns with the free energy level of MMGBSA was -46.39; -49.69 kcal/mol. eicosapentaenoic acid (EPA) has the potential to be a guide compound to inhibit ace2 receptors.

Keywords: SARS-CoV-2, PUFA, Molecule docking, Molecular dynamics, Protein spike, Navicula salinicola