

ARTICLE

Pemurnian dan Molekuler Docking Senyawa Aktif Camphora dari *Cymbopogon nardus* dengan SARS-CoV-2 Varian 7JTL

Aldhita Zahra¹, Viony Anjelina², Putri Yulia³

¹Department of Chemistry, Faculty of of Mathematic and Natural Sciences, Padang State University, Padang, Indonesia

²Department of Chemistry, Faculty of of Mathematic and Natural Sciences, Padang State University, Padang, Indonesia

³Department of Chemistry, Faculty of of Mathematic and Natural Sciences, Padang State University, Padang, Indonesia

email: ptrylaaa@gmail.com

ABSTRAK

Riset ini bertujuan menganalisis pemurnian dan kajian *molecular docking* senyawa aktif camphora dari tanaman daun serai (*Cymbopogon nardus*) dengan protease 7JTL SARS-CoV-2. Metode yang digunakan aplikasi EduPyMOL, versi 1.7.4.5-Win32 msi dan PyRx versi PyRx version 0.8 (python exe) 32 Bit. Kajian dilakukan dengan mengobservasi konformasi 3D pada molekul dan ligan yang digunakan perangkat yang digunakan adalah laptop Asus A455L, OS Windows 10 Intel(R) Core(TM) i3-4005U CPU @ 1.70GHz 1.70 GHz, RAM 4GB sebagai operasi. *Screening* molekul aktif menggunakan situs www.phytochem.nal.usda.gov. Senyawa aktifnya didapatkan dari pubchem www.pubchem.com. Hasil dari eksperimen ini adalah senyawa aktif dengan SMILES CC1(C2CCC1(C(=O)C2)C)C. Protease 7JTL juga berhasil dimurnikan dengan PyMOL. Hasil *docking* didapatkan nilai binding affinity untuk masing masing RMSD (*lower bond*) 0,0; 0,0; 1,294; 2,0; 2,011; 2,377; 1,634; 1,745; 1,34; 2,825 dan RMSD (*upper bond*) 0,0; 2,235; 2,685; 2,776; 2,863; 2,932; 3,389; 3,833, 3,9 yaitu -5,7; -5,7; -5,5; -5,4; -5,4; -5,1; -5,0; -5,0 dan -4,9 kkal/mol.

ARTICLE HISTORY

Submission: 4 Mei 2022

Revised: 23 Mei 2022

Accepted: 2 Juni 2022

Published : 4 Juni 2022

Citation: Aldhita Zahra, Viony Anjelina, Putri Yulia, Astro-Smart Vol 1 nomor 1 hal 1-5

Keywords: Camphora, Protease 7JTL, *Cymbopogon nardus*, PyMOL, PyRx.

1. Pendahuluan

Daun serai adalah tanaman yang mempunyai manfaat yang sangat banyak bagi kesehatan manusia. Salah satu manfaat daun serai adalah untuk pengobatan. Pengobatan menggunakan daun serai dapat digunakan sebagai obat penawar SARS-CoV-2. Namun sayangnya, pengobatan menggunakan daun serai masih belum optimal.

Pada penelitian ini diperlukan studi komputasi agar dapat menjelaskan bentuk dan struktur molekul protein. Berdasarkan penelitian ini, *software* PyMOL digunakan untuk menunjukkan tampilan dari struktur yang akan kita teliti. *Software* ini merupakan program

visualisasi molekul yang memberikan kualitas gambar 3D yang baik dari molekul yang diteliti. Penelitian ini dilakukan untuk pemurnian Protease SARS-CoV-2 varian 7JTL.

Dalam penelitian ini dianalisis hubungan protease dengan senyawa aktif menggunakan aplikasi PyRx dengan metode *Molecular Docking* sehingga menghasilkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. Tujuan penelitian ini untuk menganalisis interaksi senyawa aktif Camphor dari tanaman Daun Serai (*Cymbopogon nardus*) dengan protease Sars-CoV-2 varian 7JTL menggunakan software PyMOL dan PyRx.

2. Bahan dan Metode

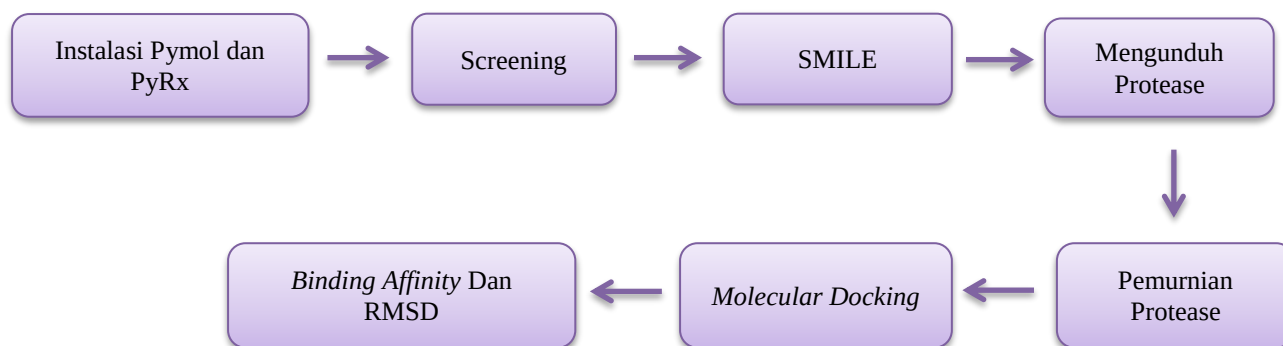
Alat dan Bahan

Screening molekul aktif menggunakan situs <http://www.phytochem.nal.usda.gov/>. Protease 7JTL protein SARS-CoV-2 dari PDB (<https://www.rcsb.org>). Struktur 3D dan SMILE molekul diperoleh dari simulasi permodelan Pubchem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>) dengan format sdf. Pemurnian protease 7JTL dilakukan melalui software PyMol 2.5.2 version (Schrödinger, Inc., USA) with an academic license. Dan *Molecular docking* dengan software Pyrex. Perangkat keras yang digunakan berspesifikasi Intel(R) Core(TM) i3-4005U CPU @ 1.70GHz 1.70 GHz, RAM 4GB.

Prosedur Penelitian

Pemurnian Protein

Perangkat lunak PyMol digunakan untuk pemurnian protein yang bersih dari air sehingga membentuk ligan yang murni. Ligan dari varian 7JTL yang telah dimurnikan membentuk struktur kimia 3D. kemudian, protein ini akan dipersiapkan untuk menjadi berkas siap pakai menggunakan fasilitas AutoDock dan openbabel didalam PyRx.



Gambar 1. Skema (Courtesy/Putri Yulia)

Validasi Metode Docking

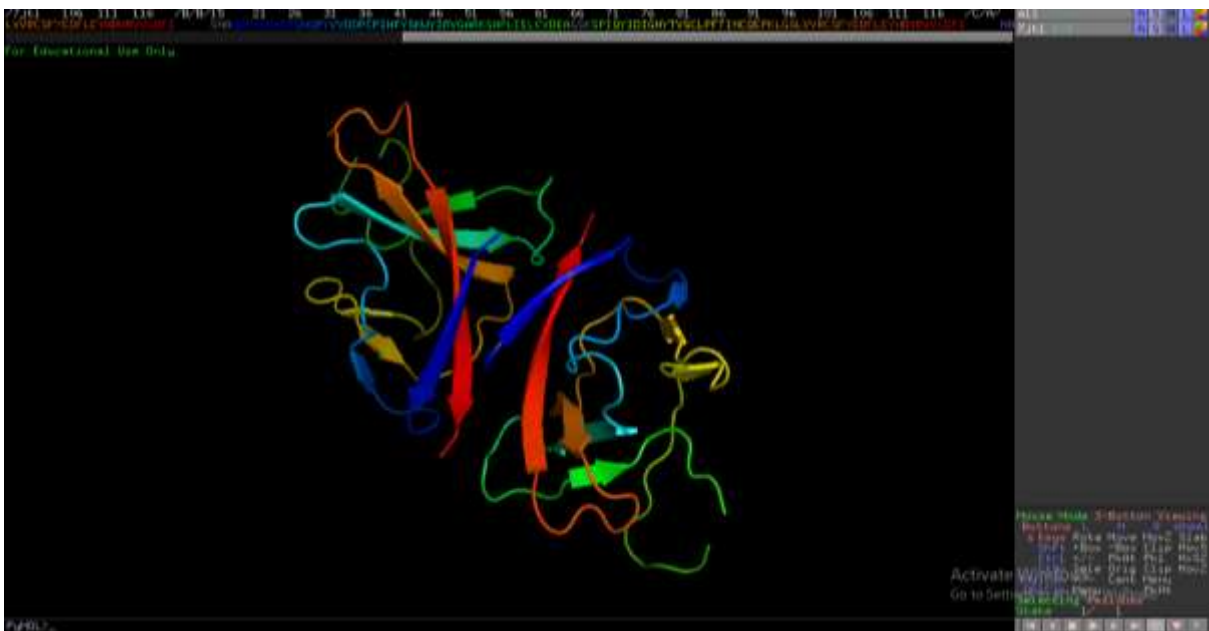
Docking terhadap ligan natif dilakukan untuk mencari konformasi 3D ligan natif terhadap reseptor dengan memperhatikan koordinat pusat masa struktur dan besaran gridbox dari binding site pocket dalam satuan angstrom (Vina) atau number of points (AutoDock). Konformasi hasil *docking* yang diperoleh disejajarkan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

sebelumnya, nilai RMSD untuk kesejajaran konformasi struktur yang masih dapat diterima adalah kurang dari 5, semakin mendekati nilai 0 maka nilai kesejajaran semakin baik.

Evaluasi

Visual gambar protease 7JTL yang steril diperoleh dari *software* PyMOL. Lalu data angka *Binding Affinity* dan RMSD diperoleh dari *software* PyRx. Kemudian nilai RMSD dan *Binding Affinity* akan dihubungkan untuk menentukan jarak dan tarikan antara molekul aktif dan protease. Dengan menggunakan Pymol mensterilkan protease nya yang kemudian dengan menggunakan PyRx untuk melihat *binding affinity*.

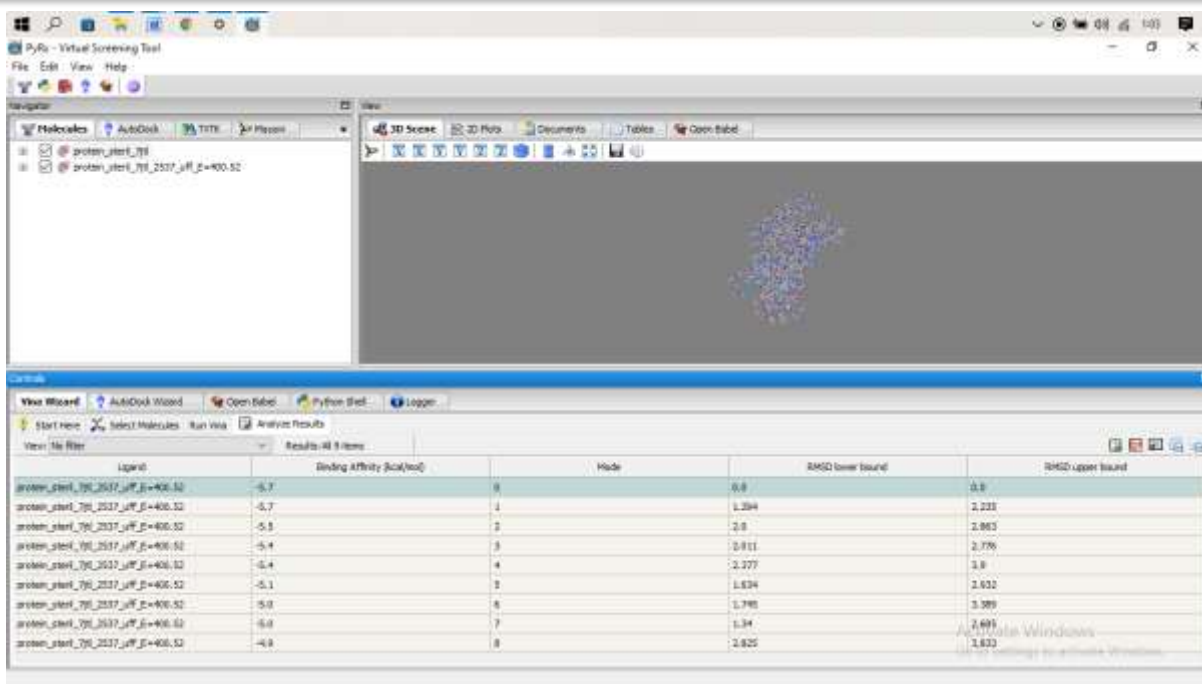
3. Hasil dan Pembahasan



Gambar 2. Protease yang telah disterilkan (Courtesy/Putri Yulia)

4.

Untuk protease yang belum dimurnikan biasanya mengandung pengotor berupa air yang ditandai dengan adanya bercak-bercak merah dan native ligand, sehingga dilakukan pemurnian menggunakan *software* PyMOL.

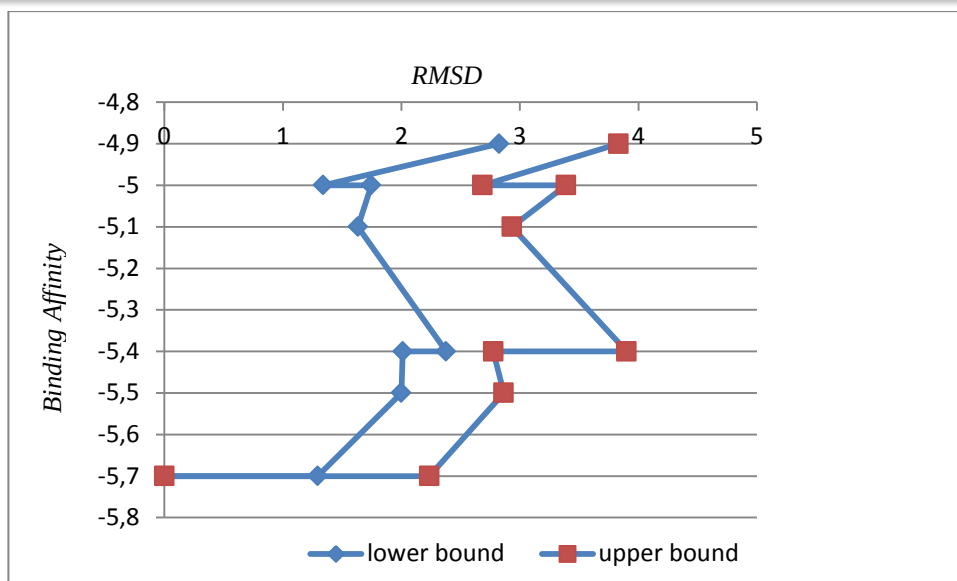


Gambar 3. *Molecular Docking* (Courtesy/Putri Yulia)

Penambatan molekul (*molecular docking*) adalah metode komputasi yang bertujuan meniru peristiwa interaksi suatu molekul ligan dengan protein yang menjadi targetnya pada uji in-vitro. *Molecular Docking* dilakukan dengan menggunakan software PyRx untuk mendapatkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. Protease yang digunakan yaitu 7JTL dengan senyawa aktif Camphor.

Ligan	Binding affinity (kcal/mol)	Mode	RMSD Lower Bound	RMSD Upper Bound
Protein_steril_7jtl_2537_uff_E=400.52	-5,7	0	0,0	0,0
Protein_steril_7jtl_2537_uff_E=400.52	-5,7	1	1,294	2,235
Protein_steril_7jtl_2537_uff_E=400.52	-5,5	2	2,0	2,863
Protein_steril_7jtl_2537_uff_E=400.52	-5,4	3	2,011	2,776
Protein_steril_7jtl_2537_uff_E=400.52	-5,4	4	2,377	3,9
Protein_steril_7jtl_2537_uff_E=400.52	-5,1	5	1,634	2,932
Protein_steril_7jtl_2537_uff_E=400.52	-5,0	6	1,745	3,389
Protein_steril_7jtl_2537_uff_E=400.52	-5,0	7	1,34	2,685
Protein_steril_7jtl_2537_uff_E=400.52	-4,9	8	2,825	3,833

Tabel 1. Hasil *Molecular Docking* senyawa aktif Camphor dengan Protease 7jtl



Gambar 4. Grafik RMSD vs *Binding Affinity* (Courtesy/Putri Yulia)

5. Kesimpulan

Hasil yang diperoleh dari menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx didapatkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. *Binding affinity* merupakan ukuran kemampuan obat untuk berikatan dengan reseptor. Semakin kecil nilai *binding affinity*, maka afinitas antar reseptor dengan ligan semakin tinggi dan sebaliknya jika semakin besar nilai *binding affinity*. Hasil menunjukkan beberapa macam *binding affinity* yang dihasilkan yaitu dari -5,7 yang paling tinggi dan *binding affinity* yang terendah -4,9. Lalu RMSD (*lower bound*) paling tinggi 0 dan paling tertinggi 2,825. RMSD (*upper bound*) yang paling rendah 0 dan yang paling tinggi 3,833.