

ARTIKEL

Penerapan PyMol dalam Pemurnian dan Isolasi Selektif Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 7LAA

Kukuh Damarjati^a, Syafira Herfina^b, Nadilla Mutia Erliansyah^{c*}

^aTeknik Sipil, Universitas Tidar, Magelang, Indonesia

^bFarmasi, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

^cDepartemen Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA), Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

*email: nadilla.mutia04@gmail.com

ABSTRAK

Riset ini bertujuan untuk mengevaluasi PyMol dalam pemurnian dan isolasi selektif pada protein spike virus sars-cov-2 varian 7LAA. Metode yang digunakan pada riset ini adalah penerapan *software* PyMol versi 2.5,2 yang diproduksi oleh Schrodinger. Aspek dalam riset ini, yaitu pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang akan dimurnikan dan diisolasi adalah salah satu varian protein spike virus yaitu Sars-Cov-2, yang diperoleh dari situs Protein Data Bank (PDB). Pengerjaan riset ini menggunakan perangkat lunak serta perangkat keras komputer dengan spesifikasi Processor Intel® Core™ i5-7200U CPU @ 2.50GHz (\$CPUs), ~2,7GHz. Dengan RAM 096MB. Varian yang dimurnikan dan diisolasi selektif yaitu LAA, sehingga menghasilkan protein murni spike virus Sars-Cov-2 varian 7LAA. Pemurnian dan isolasi selektif varian 7LAA berhasil dilakukan dengan memisahkan air serta pengotor-pengotor yang terdapat dalam spike protein sehingga dihasilkan protein spike virus Sars-Cov-2 varian 7LAA yang murni.

ARTICLE HISTORY

Submission: 12 April 2022

Revised: 28 Mei 2022

Accepted: 02 Juni 2022

Published : 05 Juni 2022

Citation:

Keywords: PyMol; Sars-Cov-2; Spike Protein

1. Pendahuluan

Studi komputasi merupakan suatu solusi dari beberapa tuntutan zaman terhadap perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi yang sangat berkembang pesat saat ini. Studi komputasi ini sangat bermanfaat karena bisa menjelaskan dan memperlihatkan bagaimana visualisasi molekul kecil maupun molekul besar seperti protein. Salah satu protein yang akan diteliti adalah Protein Spike Virus Sars-Cov-2. Namun, penerapan dari pemurnian protein dan isolasi ini belum banyak digunakan dalam kehidupan sehari-hari.

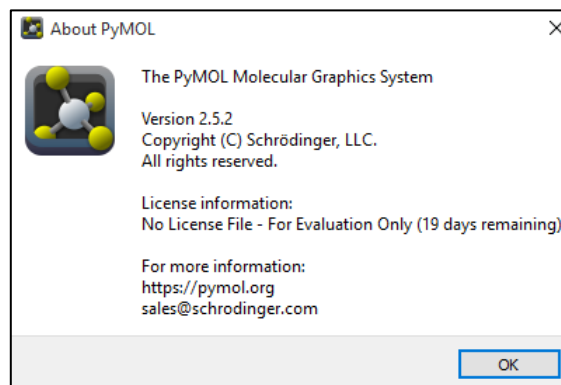
Virus Sars-Cov-2 merupakan satu dari banyaknya virus corona. Virus corona ini mewabah pada tahun 2019 hingga saat ini. Virus SarsCov-2 mengalami mutasi yang menghasilkan banyak varian, salah satunya yaitu varian 7LAA. Pemurnian dan isolasi virus diperlukan untuk mengkaji dan mengelola penyakit akibat virus tersebut. Sifat-sifat kimia fisika protein dan asam nukleat yang berbeda

antara virus atau strain virus akan menyebabkan metode pemurnian virus sangat bervariasi. Oleh karena itu diperlukan percobaan kering menggunakan teknik pemodelan molekul salah satunya menggunakan software Pymol. [1]

Dalam riset ini dikaji penggunaan PyMol untuk melihat pemurnian protein pada Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7LAA. Kajian itu diterapkan pada salah satu varian sars-cov-2 yang saat ini sedang menjadi pembicaraan hangat di dunia. Riset ini bertujuan untuk melakukan Penerapan PyMol dalam Pemurnian dan Isolasi Selektif Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 7LAA.

2. Metode

Perangkat yang digunakan adalah komputer Core™ i5-7200U CPU @ 2.50GHz (\$CPUs), ~2,7GHz. Dengan RAM 096MB. Software Pymol versi 2.5.2 dikeluarkan oleh Schrodinger, LLC. dan Situs Protein Data Bank (PDB) <https://www.rcsb.org/structure/7LAA>

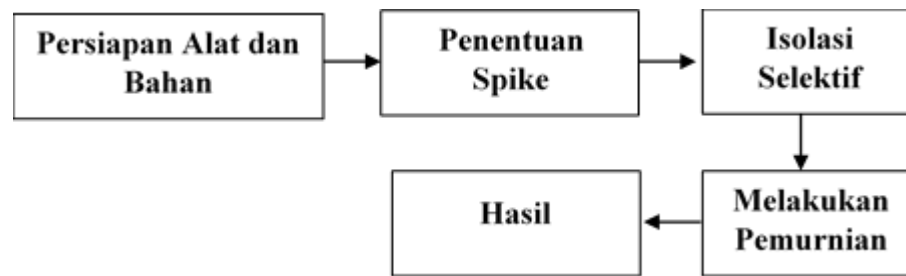


Gambar 1. Software Pymol



Gambar 2. Situs Protein Data Bank

Riset ini dilakukan secara berurutan sesuai dengan tahapan yang terlihat dalam diagram di bawah ini :



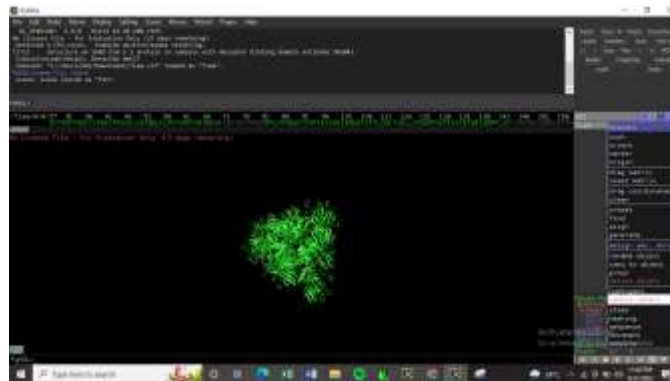
Gambar 3. Skema Riset Kajian

Persiapan Struktur

Pada tahap ini pilih struktur yang akan dilakukan isolasi dan pemurnian protein. Pada penelitian ini akan mempersiapkan struktur Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7LAA untuk dilakukan isolasi selektif. Struktur ini di dapat dari situs <https://www.rcsb.org/structure/7LAA>

Isolasi Selektif

Pada tahap ini spike protein yang sudah diunduh, kemudian diisolasi menggunakan software pymol dengan mengklik “all” atau “A”. Lalu pilih “Remove Waters”



Gambar 1 Remove Waters

Pemurnian

Pada tahap pemurnian, dilakukan dengan menghilangkan pengotor pada protein yang telah di “Remove Waters” dengan menghapus ligan pada Spike Protein

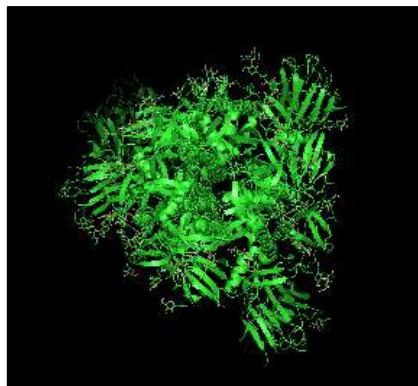
3. Hasil dan Pembahasan

Penelitian dilakukan dengan beberapa tahap, yaitu dengan menyiapkan alat dan bahan yang dibutuhkan pada pembahasan sebelumnya. Kemudian, menyiapkan Spike Protein dengan mengakses situs <https://www.rcsb.org/structure/7LAA> . merujuk pada gambar 2. Pada kajian ini menggunakan Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7LAA

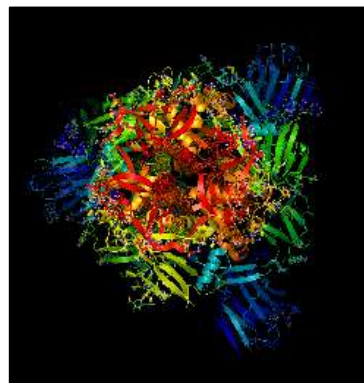


Gambar 5. Spike Protein Virus SARS-CoV-2 Varian 7LAA

Isolasi selektif dilakukan dengan pemisahan air dan pengotor lainnya pada protein. Pemisahan air dan pengotor ini menggunakan aplikasi dengan mengklik “all” atau “A”. Lalu pilih “Remove Waters”. Setelah itu, Klik “All” atau “A”, lalu pilih “Preset”, pilih “Ligand sites”, kemudian pilih ‘Cartoon’. Kemudian dapat menghapus bagian yang terputus atau pengotor untuk memperoleh Spike protein murni. Dengan demikian, tahapan dalam pemurnian protein telah selesai, sehingga diperoleh hasil Evaluasi Pemodelan Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7LAA berhasil dilakukan dengan aplikasi pymol.



Gambar 6 Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7LAA yang belum dimurnikan



Gambar 7 Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7LAA yang telah dimurnikan

4. Kesimpulan

Pada riset ini, bisa disimpulkan bahwa Spike Sars-Cov-2 varian 7LAA berhasil dimurnikan, dengan menghapus zat pengotor yang ada pada varian ini, mendapatkan hasil varian protein Sars-Cov-2 7LAA yang murni. Spike ini dimurnikan menggunakan aplikasi PyMol versi 2.5.2. Riset ini dapat dilanjutkan pada tahap interaksi molekuler secara dinamis

Ucapan Terima Kasih

Penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada semua orang, institusi, atau departemen yang mendukung riset ini.

References

[1] Santoso, Alvan. 2022. Covid-19 : Varian Dan Mutasi. *Jurnal Medika Utama*. Vol 03 No 02