

ARTIKEL

Implementasi Pymol pada Analisis Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Variansi 7NLL pada Sisi Pemurnian dan Isolasi Selektif

Gemilia Elvarino^a, Fanissa Rahmatikasari^b, Annisa Septiani Putri^{c*}

^aArsitektur Lanskap, IPB University, Bogor, Indonesia

^bTeknik Mesin, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

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

*email: annisasputrii@gmail.com

ABSTRAK

Riset ini bertujuan untuk mengimplementasikan aplikasi Pymol pada analisis protein spike virus sars-cov-2 variansi 7NLL pada sisi pemurnian dan isolasi selektif. Metode yang digunakan adalah pemodelan molekul dengan aplikasi Pymol versi 2.5.2. Riset ini menghasilkan pemurnian dan isolasi selektif pada spike protein. Protein yang digunakan adalah spike virus sars-cov-2 variansi 7NLL yang disiapkan dari situs www.pdb.org. Analisis menggunakan perangkat lunak dengan spesifikasi prosesor i5 RAM 8 GB. Hasil dari riset ini diperoleh spike virus sars-cov-2 variansi 7NLL yang sudah dimurnikan dan diisolasi berbentuk visualisasi remove water, dan visualisasi ligan. Pemurnian dan isolasi variansi 7NLL berhasil memisahkan air, dan Pengotor lain pada protein target.

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

Pada era serba digital 4.0 seperti saat ini, kimia komputasi menjadi salah satu bidang dengan pertumbuhan tercepat di kimia. Benefit yang dapat diraih dengan mengimplementasikan komputasi dalam riset dapat menginterpretasikan berbagai jenis molekul, salah satu contohnya protein. Akan tetapi, penerapan teknik-teknik komputasi sebagai media untuk memvisualisasikan molekul masih jarang dilakukan oleh para spesialis di bidang ini.

Teori struktur elektronik (metode ab initio) umumnya digunakan untuk memperoleh hasil perhitungan yang sangat akurat. Secara umum, pendekatan struktur elektronik ab initio menghasilkan hasil kualitatif yang sangat baik dan dapat meningkatkan akurasi hasil kuantitatif karena molekul yang

diteliti menjadi lebih kecil. Dalam metode struktur elektronik ini, hukum mekanika kuantum digunakan sebagai dasar perhitungan [1].

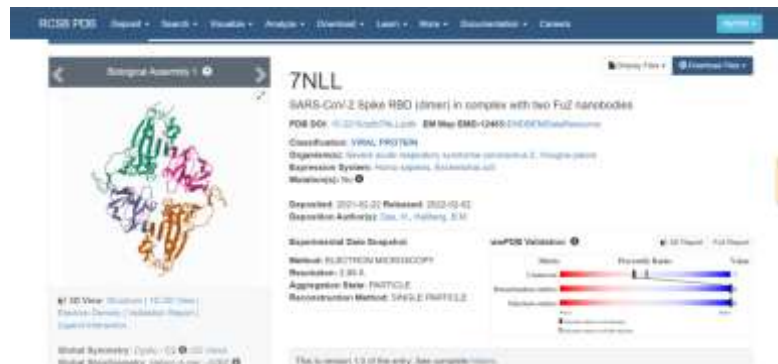
Dalam riset ini akan mengkaji tentang implementasi Pymol untuk mengisolasi dan memurnikan spike protein. Sejak pandemi virus corona mewabah hingga menciptakan banyak varian. Pada SARS-CoV-2 terdapat empat protein penting [2]. Salah satunya protein penting pada SARS-CoV-2 spike protein atau protein s. Menurut Wang et.al [3]. Spike protein merupakan salah satu antigen utama virus yang berperan dalam masuk dan penempelan virus pada reseptor Angiotensin Converting Enzyme 2 (ACE 2) dalam sel inang. Oleh karena itu, pemurnian dan isolasi selektif perlu dilakukan. Tujuan riset ini adalah mengimplementasikan pymol pada analisis spike protein SARS-CoV-2 variansi 7NLL sehingga didapatkan spike yang murni dan terisolasi selektif.

2. Metode

Perangkat yang digunakan dalam riset ini adalah laptop spesifikasi Processor Intel ® Core i5 @ 5 GHz. Dengan RAM 8 GB. Software Pymol versi 2.5.2 dikeluarkan oleh Schrödinger, LLC. Situs Protein Data Bank (PDB) [RCSB PDB - 7NLL: SARS-CoV-2 Spike RBD \(dimer\) in complex with two Fu2 nanobodies](https://www.rcsb.org/entry/7NLL)

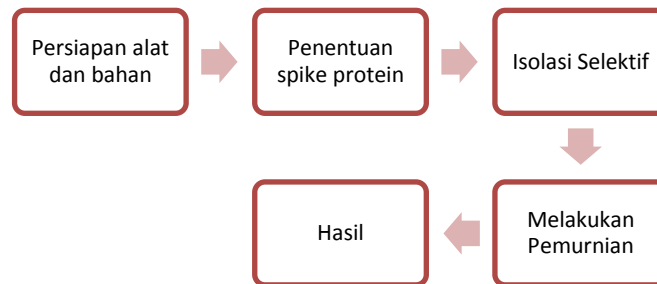


Gambar 1. Software Pymol



Gambar 2. Situs Protein Data Bank

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

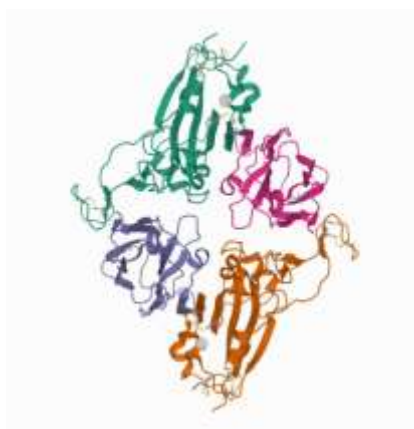


Gambar 3. Diagram kajian Riset

Tahapan pertama dalam melakukan riset ini dengan menginstall aplikasi pymol pada perangkat yang telah disiapkan sebelumnya. Kemudian tahap selanjutnya yaitu persiapan struktur spike. Tahap ini merupakan tahapan untuk memilih struktur yang akan dilakukan isolasi dan pemurnian. Pada riset ini menyiapkan struktur protein spike virus sars-cov-2 varian 7NLL untuk dilakukan isolasi selektif dan pemurnian yang didapatkan dari situs <https://www.rcsb.org/structure/7NLL>. Selanjutnya Spike protein yang telah diunduh pada tahap ini akan diisolasi menggunakan software pymol dengan mengklik “A” lalu pilih “Remove Waters”. Tahap terakhir yaitu pemurnian. Pada tahap ini akan dilakukan pemurnian protein dengan menghilangkan pengotor yang telah di “Remove Waters”, dengan menghapus ligan pada spike protein.

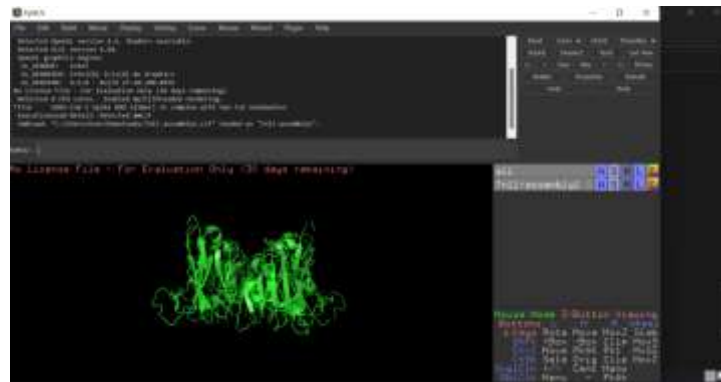
3. Hasil dan Pembahasan

The Berdasarkan hasil riset yang telah dilakukan dengan beberapa tahap yang telah dijelaskan pada bagian metode. Berdasarkan gambar 2 di atas, riset ini menggunakan spike protein virus sars-cov-2 varian 7NLL yang diakses melalui <https://www.rcsb.org/structure/7NLL> .

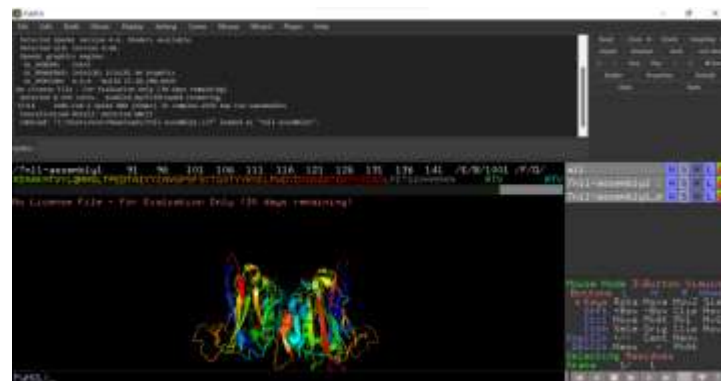


Gambar 4. Spike Protein Virus SARS-CoV-2 Varians 7NLL

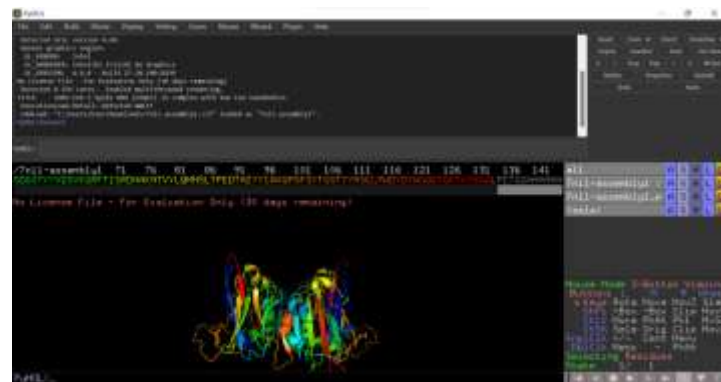
Isolasi selektif dilakukan dengan memisahkan sisa-sisa air dan juga pengotor lainnya pada protein. Pemisahan air dan pengotor tersebut dilakukan di dalam aplikasi pymol dengan mengklik “All” atau “A” kemudian klik “remove water”. Setelah itu dilakukan kembali pilih “All” atau “A” lalu klik “preset”, lalu klik “Ligan Sites”, kemudian pilih “Cartoon”. Kemudian dapat dihapus bagian spike protein yang terputus untuk menghilangkan pengotor lalu didapatkan spike protein yang sudah murni. Pada spike ini tidak terlalu banyak didapati zat pengotor, sehingga proses pemurniannya juga berlangsung lebih cepat.



Gambar 5. Spike Protein Virus SARS-CoV-2 varians 7NLL sebelum dimurnikan



Gambar 6. Spike Protein Virus SARS-CoV-2 varians 7NLL sebelum RTV dihapus



Gambar 7. Spike Protein Virus SARS-CoV-2 varians 7NLL yang sudah murni

4. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, dapat disimpulkan bahwa implementasi pymol telah berhasil mengisolasi dan memurnikan protein secara selektif dari protein spike virus sars-cov-2 variansi 7NLL. Sehingga protein bebas dari air dan pengotor lain pada protein. Diharapkan penelitian lebih lanjut dapat dilakukan untuk mengkonfirmasi temuan penelitian ini.

Ucapan Terima Kasih

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

References

- [1] Priatni, Bayu. 2007. Pemodelan Kimia Komputasi. *Jurnal Lapan*. Vo. 8, No.1
- [2] Chellapandi P, Saranya S. 2020. Genomics insights of SARS-CoV-2 (COVID-19) into target-based drug discovery. *Medichal Chemistry Research*. 29 : 1777-1791.
- [3] Wang H, Yang P, Liu K, Gou F, Zhang Y, Zhang G, Jiang C. 2008. SARS coronavirus entry into host cells through a novel clathrin- and caveolae-independent endocytic pathway. *Cell Research*. 18 : 290-301.