

ARTIKEL

Isolasi Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7DPM : Implementasi aplikasi Pymol pada Pemurnian

Selsa Arlini^a, Frayengka Alfaga^b, Fallahu Fauzan^{c*}

^aPendidikan Kedokteran, Universitas HKBP Nommensen, Medan, Indonesia

^bTeknik Elektro dan Industri, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

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

*email: fallahufauzan01@gmail.com

ABSTRAK

Riset ini bertujuan untuk mengisolasi Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7DPM : Implementasi aplikasi Pymol pada Pemurnian. Penelitian ini merupakan penelitian teoritis dengan menggunakan metode kajian komputasi pemodelan dengan menggunakan aplikasi pymol versi 2.5.2. Metode analisis komputasi pada penelitian ini menggunakan perangkat keras berupa laptop dengan processor AMD Ryzen 3 2200U with Radeon Vega Mobile Gfx 2.50 GHz, RAM 4 GB. Hasil dari penelitian ini diperoleh visualisasi protein spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7DPM dalam bentuk struktur bebas air, struktur bebas pengotor lain, dan struktur native ligand.

ARTICLE HISTORY

Submission: 25 April 2022

Revised: 28 Mei 2022

Accepted: 02 Juni 2022

Published : 04 Juni 2022

Citation:

Keywords: Isolasi Protein
Varian 7DPM, Implementas,
Aplikasi Pymol, Pemurnian

1. Pendahuluan

Studi komputasi merupakan peran penting dalam penelitian ini. studi komputasi dapat menjelaskan visualisasi molekul kecil maupun molekul besar seperti protein. salah satu protein yang diteliti adalah Protein Spike Virus Sars-Cov-2. penelitian ini menggunakan aplikasi pymol menggunakan laptop dengan processor AMD Ryzen 3 2200U with Radeon Vega Mobile Gfx 2.50 GHz.

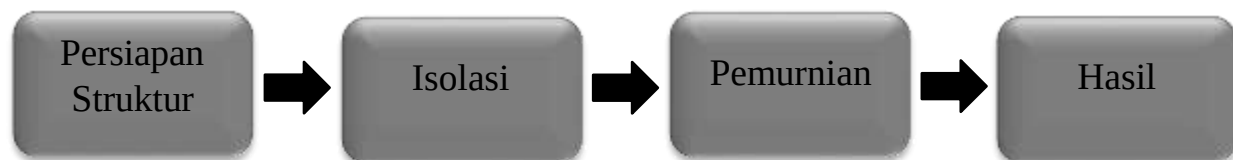
Berdasarkan hasil riset yang dilakukan salah satu aplikasi studi komputasi salah satu aplikasi pada studi komputasi adalah Avogadro, Hyperchem. Hyperchem aplikasi yang mudah digunakan karena aplikasi ini memiliki sifat yang langsung bisa menunjukkan struktur apa yang akan kita buat. struktur senyawa yang dihasilkan sangat jelas. dan juga dari aplikasi ini mendapatkan hasil dalam bentuk gambar 3 dimensi. namun terdapat juga aplikasi lain pada studi komputasi yakni Pymol. Aplikasi ini merupakan

program visualisasi molekul yang dapat memberikan kualitas gambar 3 dimensi yang baik dari molekul yang dihasilkan.

Dalam riset ini dikaji Isolasi Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7DPM : Implementasi aplikasi Pymol pada Pemurnian. Aplikasi ini digunakan untuk memurnikan sars-cov-2 yang sedang banyak dibicarakan PyMOL merupakan salah satu software yang digunakan untuk visualisasi suatu struktur biologi serta dapat menampilkan gambar dalam struktur 3 dimensi yang baik. Selain itu PyMOL juga dapat menyajikan tampilan struktur dan warna dari suatu molekul, dari molekul terkecil hingga makromolekul seperti protein. Tujuan dari riset ini adalah untuk mengisolasi protein spike virus sars-cov-2 varian 7dpm : implementasi aplikasi pymol pada pemurnian dengan menggunakan metode komputasi

2. Metode

Alat yang digunakan adalah perangkat computer dengan spesifikasi processor AMD Ryzen 3 2200U with Radeon Vega Mobile Gfx 2.50 GHz dan software digunakan pada riset ini adalah software Pymol dengan spesifikasi perangkat yang digunakan versi 2.5.2

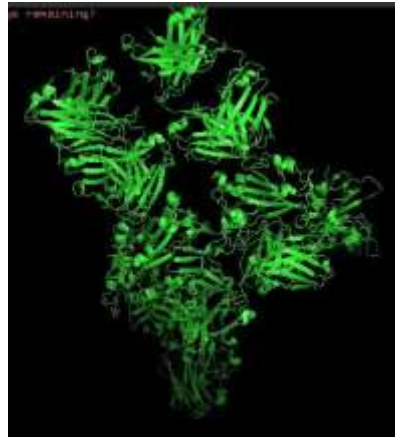


Gambar 1. Skema Kerja

Struktur protein 7DPM di download pada <https://www.rcsb.org>. Melalui google Chrome. Kemudian Struktur tersebut akan disterilkan melalui aplikasi pymol dengan cara memasukkan struktur ke dalam aplikasi melalui menu file lalu open dan tarik struktur ke dalam aplikasi, serta dan menekan tombol (S) pada kanan bawah aplikasi. Untuk memurnikan protein dari air, maka pilih bagian (A) pada kanan aplikasi lalu tekan remove water. Sedangkan untuk memurnikan protein dari natif ligan, maka pilih bagian (A) kembali dan tekan “preset” lalu klik “ligand sites” dan “cartoon”. Struktur protein 7DPM telah murni dari air dan natif ligan yang menempel. Hasil struktur dapat disimpan dalam format “PDB” dengan cara klik “file” lalu “Export Molecule”, file dapat disimpan dengan nama “spike_7DPM_murni” dan pilih format “PDB” lalu “save”. Struktur protein 7DPM berhasil disave.

3. Hasil dan Pembahasan

Hasil pencarian struktur protein 7DPM pada <https://www.rcsb.org>. menunjukkan bahwa protein tersebut belum murni. Struktur protein 7DPM masih mengandung air dan warna yang dihasilkan tidak sempurna .



Gambar 2 : Struktur Awal Protein Menggunakan Pymol

Air yang terdapat pada protein tersebut dihilangkan dengan klik “remove waters” dan lalu kemudian dimurnikan lagi dengan klik bagian “preset dan cartoon”. dan hasil dari langkah ini dapat dilihat protein tersebut memiliki bentuk warna yang sempurna dengan awalnya bewarna hijau.



Gambar 3 Struktur murni dari air menggunakan pymol



Gambar 4 Struktur Protein Murni Menggunakan Pymol

Protein yang telah berhasil diisolasi dan dimurnikan siap langsung disimpan dengan format “PDB”

4. Kesimpulan

Riset ini berhasil menghasilkan protein varian 7DPM Sars-Cov yang murni dari air dan pengotor lainnya. Hasil dari penelitian ini diperoleh visualisasi protein spike Virus Sars-Cov- 2 Varian 7DPM dalam bentuk struktur bebas air, struktur bebas pengotor lain ,dan struktur native ligand. Penelitian lanjutan dapat dilakukan pada tahapan interaksi molekuler secara dinamis

Ucapan Terima Kasih

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

References

- [1] Siregar, A. D., & Harahap, L. K. (2020). Pengembangan E-Modul Berbasis Project Based Learning Terintegrasi Media Komputasi Hyperchem Pada Materi Bentuk Molekul. JPPS (Jurnal Penelitian Pendidikan Sains), 10(1), 1925-1931.
- [2] Chellapandi P, Saranya S. 2020. G enomics insights of SARS-CoV-2 (COVID-19) into target-based drug discovery. Medichal Chemistry Research. 29 : 1777-1791.