

ARTICLE

Isolasi Selektif dan Pemurnian Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 6VW1 Menggunakan Aplikasi Pymol

Putri Dwi Azizi¹ Resti Sahusna² Dhea Pidiana³

Keperawatan, Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan, Universitas Jambi, Jambi, Indonesia

Teknik Kimia Bahan Nabati, Politeknik ATI Padang, Padang, Indonesia

Pendidikan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA),

Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

*Corresponding email: pidianadhea@gmail.com

ABSTRACT

Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi pemodelan protein varian 6VW1 Virus Sars-Cov-2. Penelitian ini menggunakan teknik pemodelan molekul menggunakan aplikasi Pymol versi 2.5.2 yang diterbitkan oleh Schodinger, LLC. Aspek kajian dalam penelitian ini adalah pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang digunakan adalah Virus Spike varian SarsCov2 yang dibuat oleh <https://www.rcsb.org/structure/6VW1>. Analisis computer menggunakan perangkat lunak, perangkat keras, perangkat komputer LAPTOP-5TGJOGVG dengan spesifikasi Intel(R) Core(TM) i3-6006U CPU @ 2.00GHz 1.99 GHz dengan RAM 4,00 GB (3,89 GB usable). Hasil penelitian ini diperoleh varian yang diisolasi dan dimurnikan adalah spike sars-cov-2 varian 6VW1. Pemurnian dan isolasi varian 6VW1 berhasil memisahkan air dan kotoran lain dalam protein target. Aspek pemurnian dan isolasi selektif dengan pymol. Hasil yang diperoleh adalah protein murni spike Sars-Cov-2 varian 6VW1.

ARTICLE HISTORY

Submission:

Receveid:

Accepted:

Citation:

Keywords: *Sars-Cov-2, Pymol, 6VW1*

1. Introduction

Dalam perkembangan teknologi, kita perlu bekerja dengan cepat dan mudah. Teknik ini juga sangat penting dalam penelitian ilmiah yang dikaji. Ekperimen computer memainkan peran penting dalam pengembangan ikmu pengetahuan. Perkembangan komputasi yang sangat pesat,

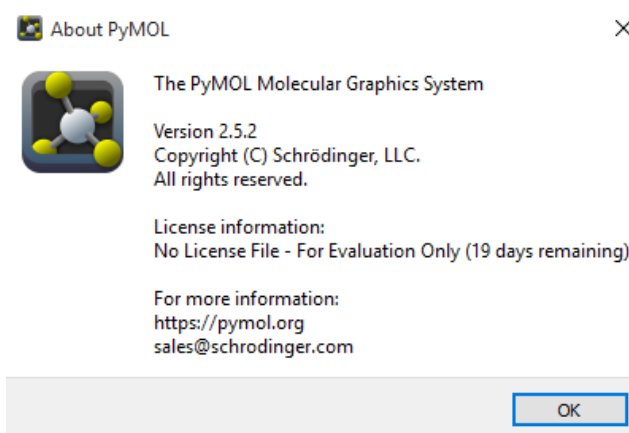
yang dimulai pada tahun 1950, mengubah dekripsi system kimia dengan memasukkan unsur baru antara eksperimen dan teori adalah kimia komputasi (*computer experimentation*). Namun, dalam eksperimen computer model masih tetap menggunakan hasil dari pakar kimia teoritis.

Kimia komputasi adalah aplikasi kimia yang menggunakan komputer untuk memecahkan masalah. Kimia komputasi merupakan salah satu bidang kimia yang berkembang pesat saat ini. Pengembangan fitur perangkat lunak semakin meningkat. Tersedianya bermacam - macam jenis software kimia komputasi secara gratis seperti Hyperchem, ChemLab, NwChem, Pymol, Gaussian, ACD/ChemSketch sebaiknya digunakan semaksimal mungkin. Dari beberapa software yang disebutkan, disini dibahas tentang aplikasi Pymol.

Dalam penelitian ini, pymol digunakan untuk memurnikan Spike Protein, spike virus Sars-Cov-2 varian 6VW1. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengevaluasi pemodelan varian 6VW1 Spike Protein virus Sars-Cov-2 menggunakan teknik pemodelan molekul menggunakan aplikasi Pymol.

2. Experimental

Perangkat yang digunakan adalah komputer spesifikasi Intel(R) Core(TM) i3-6006U CPU @ 2.00GHz 1.99 GHz. Dengan RAM 4,00 GB (3,89 GB usable). Perangkat lunak Pymol versi 2.5.2 yang diterbitkan oleh Schodinger, LLC.dan Situs Protein Data Bank (PDB). <https://www.rcsb.org/structure/6VW1>.



Gambar 1. Software Pymol



Gambar 2. Situs Protein Data Bank

Penelitian ini dilakukan secara sistematis secara bertahap, seperti terlihat pada skema pada Gambar 3.



Gambar 3. Skema Riset Kajian

Persiapan Struktur

Pada tahap ini, pilih struktur yang akan diisolasi. Dalam penelitian ini, menyiapkan struktur protein spike Virus Sars Cov-2 varian 6VW1 untuk diisolasi selektif. Struktur ini diambil dari situs <https://www.rcsb.org/structure/6VW1>.

Isolasi Selektif

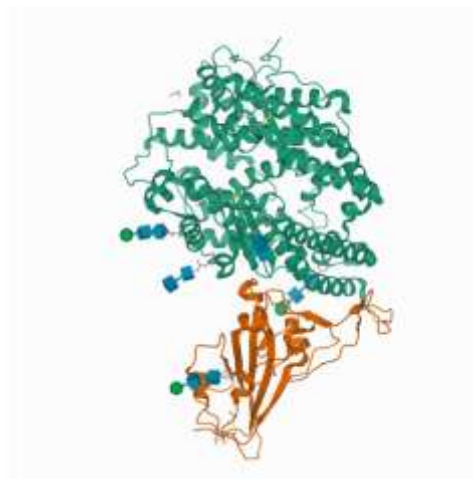
Pada tahap ini, protein yang diunduh diisolasi menggunakan perangkat lunak Pymol dengan Mengklik “all” atau “A”. Kemudian pilih “Remove Waters”.

Pemurnian

Pada tahap pemurnian, dengan menghilangkan kotoran dari protein yang telah di “Remove Waters” dengan menghilangkan ligan pada Spike Protein.

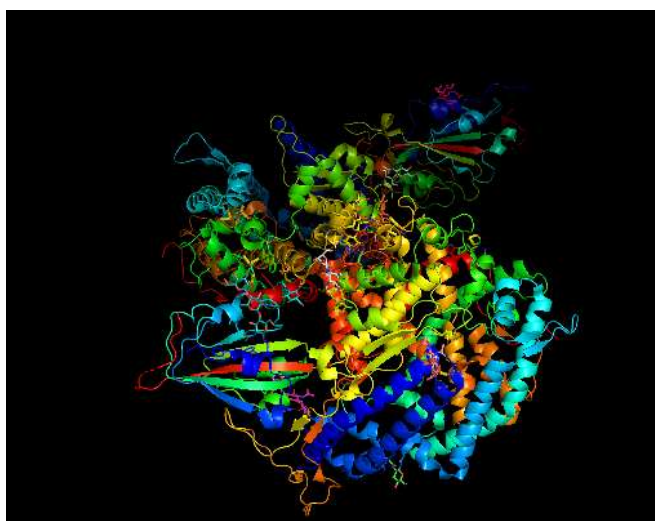
3. Results and discussion

Penelitian dilakukan dengan beberapa tahap, yaitu menyiapkan alat dan bahan yang diperlukan pada pembahasan sebelumnya. Selanjutnya, buka situs <https://www.rcsb.org/structure/6VW1> dan siapkan Spike Protein. Lihat pada gambar 2. Dalam penelitian ini menggunakan Spike Protein Virus SarsCov-2 varian 6VW1.

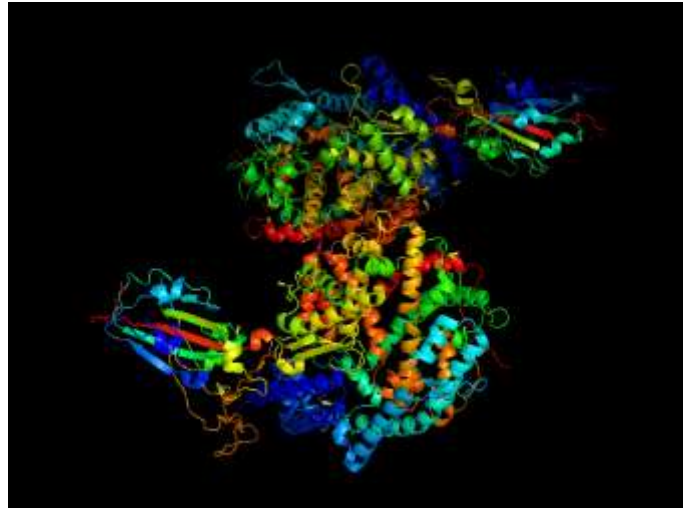


Gambar 4. Protein Spike Virus SarsCov-2 Varian 6VW1

Isolasi selektif dilakukan dengan menghilangkan air dan pengotor lain dalam protein. Pemisahan air dan kotoran dilakukan melalui aplikasi dengan mengklik “all” atau “A”. Kemudian pilih “Remove Waters”. Kemudian klik “All” atau “A” dan pilih “Preset > Ligand Sites > Cartoons”. Kemudian dapat menghapus bagian yang terputus dan kotoran untuk mendapatkan Spike Protein Murni. Dengan demikian, langkah - langkah pemurnian protein telah berhasil, dan didapatkan hasil evaluasi Pemodean Protein Spike Varian 6VW1 Virus SarsCov-2 menggunakan aplikasi Pymol.



Gambar 5. Protein Spike Virus SarsCov-2 Varian 6VW1 yang belum dimurnikan



Gambar 6. Protein Spike Virus SarsCov-3 varian 6VW1 yang telah dimurnikan

4. Conclusion

Pemurnian dan isolasi selektif dari Protein Spike Virus SarsCov-2 varian 6VW1 berhasil dilakukan, menghasilkan protein murni yang bebas dari air dan kotoran lainnya.