

ARTICLE

Studi Komputasi Menggunakan Aplikasi Pymol pada Aspek Pemurnian dan Isolasi Protein Spike Virus Sars Cov-2 Varian 7MKY

Muhammad Fikri¹, Tenti Amelya², Ezra Delfianza^{3*}

¹Department of Electrical Technology, Kolej Komuniti Kuala Langat, Selangor, Malaysia

²Department of Statistics, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Brawijaya, Malang, Indonesia

³Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

*Corresponding email: ezradelfianza191200@gmail.com

ABSTRACT

Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis hasil pemurnian, dan isolasi selektif protein spike virus sars-cov-2, varian 7MKY menggunakan aplikasi pymol. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah studi komputasi menggunakan aplikasi pymol versi 2.5.2. Aspek kajian dalam penelitian ini adalah pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang digunakan adalah spike virus sars-cov-2 varian 7MKY yang diambil dari RCSB PDB Protein Data Bank pada link <https://www.rcsb.org>. Analisis komputasi menggunakan Laptop dengan spesifikasi prosesor Intel® Core™ i3-6006U @ 2.0GHz, dan kapasitas RAM sebanyak 4GB. Penelitian ini berhasil dilakukan dengan dihasilkan protein yang murni tanpa air, dan isolasi protein selektif, terpisahnya air dan pengotor lainnya pada protein target, menggunakan Aplikasi Pymol dengan visualisasi yang baik.

ARTICLE HISTORY

Submission: 4 Mei 2022

Received: 21 Mei 2022

Accepted: 4 Juni 2022

Citation:

Keywords: Aplikasi Pymol, Pemurnian, Isolasi Selektif, Protein Varian 7MKY

1. Pendahuluan

Pemodelan molekul merupakan aspek utama dalam penelitian ini. Pemodelan molekul dapat mengvisualisasikan bentuk suatu molekul dengan jelas. Baik berbentuk 3D ataupun 2D. Visualisasi yang dihasilkan dapat mengatasi kelemahan dari teori bentuk molekul. Namun, implementasi dalam pemodelan molekul ini masih belum optimal.

Berdasarkan hasil penelitian, diketahui ada banyak aplikasi yang dapat digunakan dalam pemodelan molekul ini. Salah satunya adalah aplikasi pymol. Aplikasi pymol merupakan salah satu aplikasi yang dapat digunakan untuk studi komputasi. Selain aplikasi pymol juga terdapat aplikasi lain yang dapat

digunakan dalam studi komputasi seperti, aplikasi hypercam, avogadro, chemoffice, chemdraw, chemsketch dan lain sebagainya.

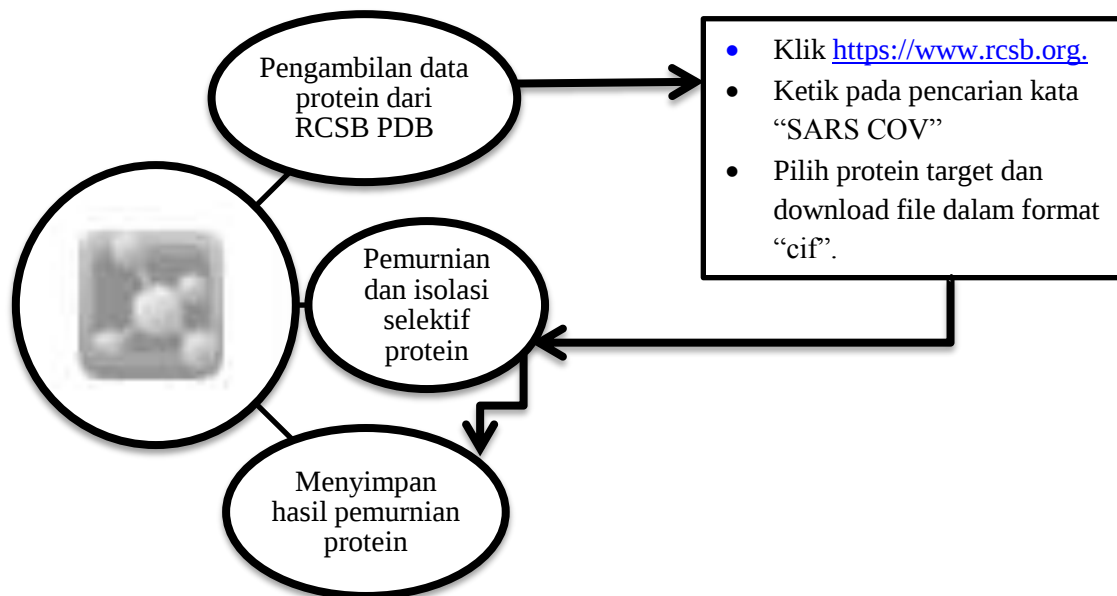
Pada penelitian ini akan dibahas mengenai bentuk struktur murni dari protein spike sars cov-2, yang sedang booming dibicarakan. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah studi komputasi menggunakan aplikasi pymol versi 2.5.2. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis studi komputasi menggunakan aplikasi pymol pada aspek pemurnian dan isolasi selektif protein spike virus sars-cov-2.

2. Prosedur

Penelitian ini menggunakan metode studi komputasi dengan aplikasi *pymol* versi 2.5.2. Untuk analisis lanjut mengenai pemurnian dan isolasi selektif protein spike virus sars-cov-2 varian 7MKY dilakukan beberapa tahapan sesuai yang tertera pada *flowchart* dibawah ini. Penelitian dilakukan dengan 2 tahap, yakni (1) Tahap persiapan, yang mana spike diperoleh dari RCSB PDB Protein Data Bank pada link <https://www.rcsb.org>. (2) Tahap pelaksanaan, dilakukan pemurnian protein untuk menghilangkan air dan spesi atau zat pengotor lainnya pada protein.

Pada aplikasi pymol, protein spike virus sars-cov-2 varian 7MKY, dilakukan pemurnian dan isolasi selektif protein , kemudian dianalisis. Dengan proses seperti berikut :

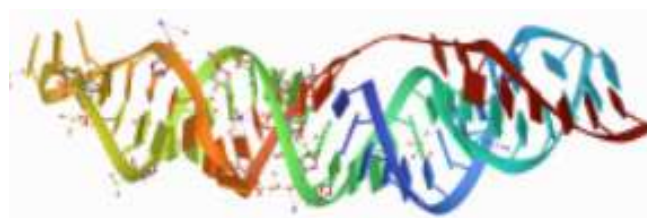
- Memasukkan data protein kedalam aplikasi pymol untuk dianalisis. Dengan cara: pilih file kemudian klik open dan pilih file protein yang telah didownload diawal tadi dalam bentuk cif.
- Pemurnian protein untuk menghilangkan air dan zat pengotor lainnya pada protein target. Dengan cara, pada aplikasi pymol klik “A” kemudian pilih *remove waters*.
- Kemudian, Dengan cara yang sama seperti point 2 diatas tetapi dengan memilih *present*, lalu *ligand sites* dan terakhir pilih *cartoon*.
- Menyimpan hasil pemurnian dan isolasi selektif protein, dengan memilih “file” kemudian *export molecule* dan simpan dalam format *pdb*. Terakhir klik *save*.



Gambar 1. Flowchart pemurnian dan isolasi selektif spike protein sars-cov-2 varian 7MKY

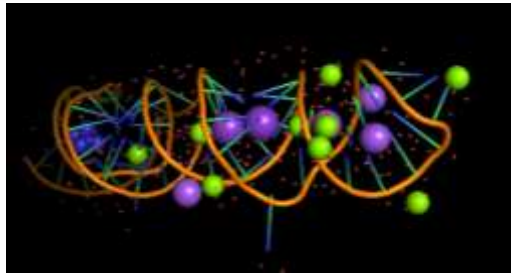
3. Hasil dan Pembahasan

Ada banyak jenis protein sars cov-2, pada penelitian ini dipilih protein varian 7MKY untuk dilakukan pemurnian dan isolasi selektif protein. Data semua jenis protein diperoleh dari RCSB PDB (Protein Data Bank). Terlihat struktur protein varian 7MKY dalam bentuk 3D (pada gambar 2) sebelum dilakukan proses pemurnian protein.

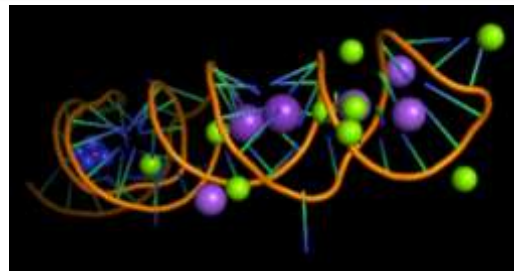


Gambar 2. Struktur protein varian 7MKY (3D)

Proses pemurnian protein menggunakan aplikasi Pymol dimulai dengan menghilangkan air pada protein yang akan dimurnikan dengan cara remove water. Dapat dilihat pada (gambar 3) protein yang mengandung banyak air, masih banyak titik-titik merah disekitar protein tersebut. Setelah dilakukan remove water, terlihat titik-titik merah yang berada disekitar protein hilang (gambar 4). Proses *remove waters* merupakan salah satu tahap untuk melakukan pemurnian dan isolasi selektif protein.

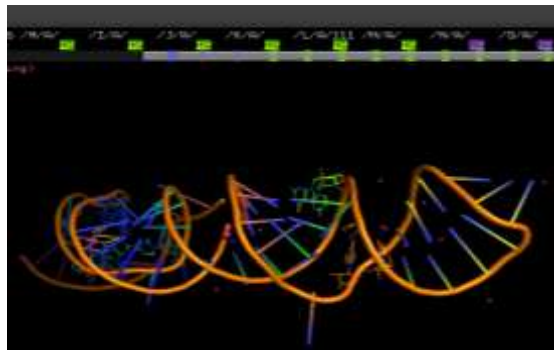


Gambar 3. Protein 7MKY masih terdapat air



Gambar 4. Protein 7MKY setelah *remove waters*

Protein memiliki ukuran yang sangat besar dan tidak memungkinkan untuk dilakukan isolasi semuanya secara langsung. Maka, dilakukan isolasi selektif protein untuk sebagian dari protein tersebut. Pada (gambar 5), terlihat bahwa telah dilakukan isolasi selektif protein dan adanya perubahan bentuk protein dari yang sebelumnya. Untuk memastikan bahwa protein berhasil di murnikan dan dilakukan isolasi selektif protein. Zat-zat pengotor pada protein harus benar-benar hilang. Dengan cara “NAG/MD/NA” yang diatasnya tidak terdapat angka, maka harus dihilangkan. Sebelum dihilangkan, masih terdapat bintik-bintik merah pada area protein.



Gambar 5. Protein 7MKY sebelum dimurnikan

Hasil pemurnian dan isolasi selektif protein berhasil dilakukan dengan terbentuknya struktur protein seperti pada (gambar 6). Tidak terdapat lagi zat-zat pengotor pada protein baik dalam bentuk air atau zat pengotor lainnya. Hasil protein yang sudah murni telah disimpan dan diperoleh datanya.



Gambar 6. Hasil pemurnian dan isolasi selektif protein 7MKY

4. Kesimpulan

Dari penelitian ini telah berhasil didapatkan protein yang murni, tanpa mengandung air dan zat pengotor lainnya pada protein target, dengan visualisasi yang baik menggunakan aplikasi pymol, serta juga dihasilkan protein selektif untuk varian 7MKY.