

ARTICLE

(Studi Penggunaan Aplikasi Pymol Untuk Pemurnian Dan Isolasi Selektif Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 6XRB)

Nanda Octaviano^a Annisa Gusri Yuni^b Dinda Novia Putri^c Salsabilla Azzara^d

^aAnalisis Kimia, Politeknik AKA Bogor, Bogor, Indonesia

^bTeknik Kimia Bahan Nabati, Politeknik ATI Padang, Padang, Indonesia

^cDesain Komunikasi Visual, Fakultas Bahasa dan Seni, Universitas Negeri Padang (UNP), Padang, Indonesia

^dPendidikan Kimia, Departemen Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Padang (UNP), Padang, Indonesia

*Corresponding email: salsabillaazzara2@gmail.com

ABSTRAK

Tujuan dari riset ini adalah untuk mengkaji tentang isolasi serta pemurnian Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 6XRB dengan menggunakan aplikasi PyMOL. Riset ini merupakan penelitian teoritis dengan metode kajian Pemodelan Molekul atau Kimia Komputasi. Metode analisis Komputasi ini menggunakan perangkat keras berupa laptop dengan Model HP 1000 Notebook PC, Processor Intel(R) Core(TM) i3-2328M CPU @ 2.20GHz (4CPUs), ~2.2GHz, RAM 4 GB dan menggunakan aplikasi PyMOL versi 2.5.2. Protein yang akan diisolasi dan dimurnikan adalah salah satu Spike Sars-Cov-2 yaitu Varian 6XRB yang disiapkan dari Protein Data Bank (RCSB PDB). Hasil dari riset ini adalah Visualisasi Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 6XRB dalam bentuk struktur bebas air, struktur native ligand dan struktur bebas pengotor lainnya.

ARTICLE HISTORY

Submission: 04 April 2022

Received: 01 Juni 2022

Accepted: 04 Juni 2022

Published: 05 Juni 2022

Citation:

Keywords:

Kimia Komputasi; PyMOL; Spike Sars-Cov-2; 6XRB

1. Pendahuluan

Kebutuhan akan perkembangan teknologi dalam berbagai bidang ilmu juga memelopori berkembangnya sains secara pesat yang meliputi teori dan eksperimen. Namun dalam berbagai hal pemodelan dan penyederhanaan dari hitungan yang kompleks, mengakibatkan aplikasi dari teoritis ini tidak mampu menjelaskan bentuk riil dari sistem makroskopis, seperti sistem protein.

Maka dari itu, dibutuhkan pelengkap yang mampu memecahkan masalah yang ditemui para ahli yaitu pengaplikasian kimia komputasi.

Kimia komputasi adalah cabang kimia yang menggunakan hasil kimia teori yang diterjemahkan kedalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya. Kimia komputasi dapat pula melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar (atau banyak molekul protein gas, cairan, padatan, dan kristal cair), dan menerapkan program tersebut pada sistem kimia nyata. (Priyanto, 2005).

Berdasarkan riset yang terbaru, ada beberapa aplikasi yang dapat digunakan untuk komputasi diantaranya adalah aplikasi Avogadro, HyperChem dan PyMOL. Namun tidak banyak yang menggunakan aplikasi tersebut. Aplikasi Avogadro adalah aplikasi visualisasi dan editor molekul yang dikembangkan oleh sekelompok peneliti dari Pittsburgh University. Aplikasi ini memiliki fitur visualisasi molekul teori VSEPR dan kimia organik. (Taylor Cornell, 2015).

Aplikasi HyperChem dapat digunakan untuk menggambar struktur kimia, optimasi geometri dengan berbagai macam model, study molecular dinamik dasar, study QSAR, dan lain-lain. Aplikasi ini juga merupakan suatu program simulasi dan pemodelan molekular yang memungkinkan perhitungan kimiawi yang kompleks. (Pranowo, 2000)

PyMOL adalah sistem visualisasi molekuler open source yang dibuat oleh Warren Lyford DeLano. PyMOL dapat menghasilkan gambar 3D berkualitas tinggi dari molekul kecil dan makromolekul biologi, seperti protein.

Dari beberapa aplikasi tersebut, PyMOL memiliki fitur menghasilkan gambar menjadi 3D dan berkualitas tinggi sangat efektif untuk mengisolasi dan memurnikan Protein Spike Sars-Cov-2 salah satunya Varian 6XRB. Sehingga riset ini akan mengkaji salah satu aplikasi yang digunakan untuk komputasi yaitu penggunaan aplikasi PyMol untuk isolasi selektif dan pemurnian pada Protein Spike Sars-Cov-2 salah satunya Varian 6XRB.

2. Metodologi

Alat dan bahan yang digunakan dalam riset ini adalah laptop dengan spesifikasi Processor Intel(R) Core(TM) i3-2328M CPU @ 2.20GHz (4CPUs), ~2.2GHz, RAM 4 GB dan Aplikasi PyMol versi 2.5.2.



Gambar 1: Aplikasi PyMOL

Untuk cara isolasi selektif serta pemurnian protein Spike Sars-Cov-2 yaitu:

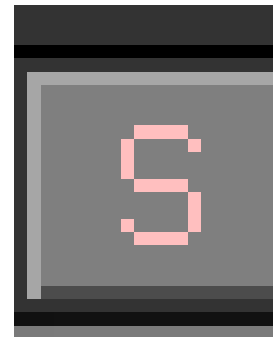
1. Tentukan salah satu protein (protein target) yang akan dimurnikan dan diisolasi, dengan membuka google chrome lalu cari “RCSB PDB”(Protein Data Bank). Salah satu Varian yang akan digunakan yaitu 6XRB lalu download file nya dengan format CIF

**Gambar 2a: RCSB PDB****Gambar 2b: Spike 6XRB**

- Setelah itu, beralih ke aplikasi PyMOL. Untuk menampilkan spike yang telah terunduh ke aplikasi PyMOL maka klik “File” pada aplikasi lalu klik “Open” lalu cari spike tersebut

**Gambar 3b: Tampilan 6XRB Aplikasi PyMOL**

- Lalu klik “S” (sele) pada bagian bawah kanan, dimana akan menampilkan bagian atas spike

**Gambar 4a: Tool Aplikasi Pymol****Gambar 4b: Sele**

- Lalu klik kanan “A” (all) pada spike yang sudah di masukkan dan pilih “Remove Waters” untuk menghapus struktur air dari spike.



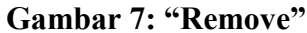
Γ Γ 1 1:1 1 "A" (11) 1 : 1 1 :1:1 : 1 1: :1:1 1:

-



6. Kemudian gesek ke ujung kanan lalu hapus bagian yang

-



3. Hasil dan Pembahasan

Setelah didapatkan file Spike Sars-Cov-2 Varian 6XRB dari Protein Data Bank maka file tersebut dipindahkan ke aplikasi PyMOL untuk diisolasi dan dimurnikan. Pada aplikasi PyMOL, klik “Sele (S)” pada bagian bawah kanan untuk menampilkan angka pada bagian atas, lalu Klik “All (A)” dan klik “Remove Waters” dan klik “(A)” lagi lalu pilih “Ligan sites” lalu “Cartoon”, lalu geser kekanan sampai ujung angka bagian atas dengan “drag” dan select serta klik “remove”. Maka dihasilkan lah Spike Murni dari Varian 6XRB yang telah diisolasi dan dimurnikan.



Sebelum isolasi dan pemurnian



Setelah isolasi dan pemurnian

4. Kesimpulan

The Dari hasil ini dihasilkan Spike Murni Sars-Cov-2 Varian 6XRB menggunakan aplikasi PyMOL. Hasil nya berupa Visualisasi struktur bebas air, struktur native ligand dan struktur pengotor bebas lainnya. Aplikasi PyMOL menjadi salah satu aplikasi yang sangat efektif digunakan dalam komputasi yaitu dengan memurnikan dan mengisolasi Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 6XRB.

Ucapan Terima Kasih

Puji syukur kehadiran Allah SWT, atas limpahan Rahmat dan Karunia-Nya, sehingga penulis dapat membuat artikel dengan judul: Studi Penggunaan Aplikasi Pymol Untuk Pemurnian Dan Isolasi Selektif Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 6XRB.

Penghargaan dan terima kasih penulis berikan kepada Bapak Prof. Dr. Rahadian Z., S.Pd.,M.Si selaku Dosen Pengampu Mata Kuliah Pemodelan Molekul yang telah membantu penulisan artikel ini.

Serta ucapan terima kasih kepada teman-teman yang membantu dalam pengerjaan artikel ini:

Nanda Octaviano (Analisis Kimia, Politeknik AKA Bogor)

Annisa Gusri Yuni (Teknik Kimia Bahan Nabati, Politeknik ATI Padang)

Dinda Novia Putri (Desain Komunikasi Visual, Fakultas Bahasa dan Seni, Universitas Negeri Padang (UNP), Padang)

Akhir kata penulis menyadari bahwa dalam penulisan artikel ini masih jauh dari kesempurnaan. Karena itu, penulis memohon saran dan kritik yang sifatnya membangun demi kesempurnaannya dan semoga bermanfaat bagi kita semua. Amiin

Padang, Juni 2022

Kepustakaan

Pranowo, H.D., (2000), *Kimia Komputasi*, Universitas Gajah Mada, Yogyakarta.

Priyanto,B., (2005), *Irridasi Sitosin: Study Dehydrogenasi Dengan Kehadiran Radikal OH Menggunakan Program CPMD*, Laporan Hasil Penelitian, Lapan.

Taylor Cornell, G. H. 2015. *Avogadro Preface*. Diambil kembali dari *Avogadro: Molecular Editor and Viasualization*: <http://www.avogadro.cc/preface>.