

ARTICLE

Studi Molekular dengan Pymol pada Purifikasi dan Isolasi Selektif Protein Spike Varian 6WZQ Virus Sars-Cov-2

Fiki Of Fernando¹, Zulaika Widia Erita², Silvia Afendi^{3*}

^aPendidikan Kedokteran Hewan, Kedokteran Hewan, Universitas Syiah Kuala, Aceh, Indonesia

^bMatematika, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

^cKimia, Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Padang, Indonesia

*email: vyia5312@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan untuk analisis molekular dengan Pymol pada purifikasi dan isolasi selektif protein spike varian 6WZQ virus Sars-Cov-2. Metode yang digunakan adalah pemodelan molekul dengan aplikasi Pymol versi 2.5.2 yang dikeluarkan oleh Schrödinger. Riset ini memiliki dua kajian yaitu Purifikasi dan Isolasi Selektif Protein Spike Varian 6WZQ Virus Sars-Cov-2. Protein yang dipakai adalah protein varian spike Sars-Cov-2 yang disiapkan dari purchem <http://www.rcsb.org/structure/6WZQ>. Analisis pemodelan ini menggunakan perangkat keras komputer dengan spesifikasi Intel(R) Celeron(R) CPU N2840 @ 2.16GHz 2.16 GHz dengan Installed RAM 2,00 GB (1,88 GB usable). Hasil ini didapatkan dari varian yang diisolasi adalah spike protein Sars-Cov-2 6WZQ. Hasil dari penelitian ini berupa protein Sars-Cov-2 varian 6WZQ yang telah dimurnikan dari air, natif ligand dan pengotor lainnya.

ARTICLE HISTORY

Submission: 04 April 2022

Received: 21 Mei 2022

Accepted: 05 Juni 2022

Citation:

Fiki Of Fernando, Zulaika Widia Erita, dan Silvia Afendi (2022). Jurnal Iklim Kelas. Volume 1 No. 1 Halaman 1-4

Keywords: Purifikasi dan Isolasi, Pymol, Protein Varian Spike 6WZQ Sars-Cov-2

1. Pendahuluan

Studi komputasi adalah kajian utama yang menarik pada riset pemurnian dan isolasi selektif protein spike varian 6WZQ Sars-Cov-2. Studi komputasi merupakan kajian yang digunakan untuk menggambarkan visualisasi menggunakan komputer. Pada riset ini yang akan dibahas pemodelan molekul protein yaitu protein spike virus Sars-Cov-2 dengan varian yang telah ditentukan. Namun implementasi molekular dan pemodelan belum banyak dan belum optimal dilakukan, dan kegunaannya masih belum maksimal dan juga masih sangat terbatas.

Studi Molekular dengan Pymol pada Purifikasi dan Isolasi Selektif Protein Spike Varian 6WZQ Virus Sars–Cov–2 | 2

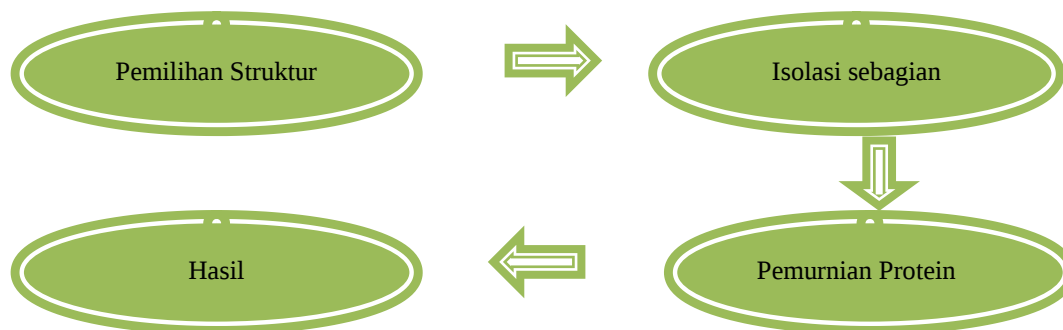
Berdasarkan hasil riset, studi komputasi sudah banyak digunakan salah satunya dalam pemurnian protein menggunakan aplikasi Pymol. Ada beberapa aplikasi yang sudah banyak digunakan diantaranya Avogadro, hypercham, dan Pymol. Hypercham adalah suatu program simulasi dan pemodelan molekuler yang memungkinkan perhitungan kimiawi yang kompleks. Sedangkan Avogadro adalah visualisasi molekul yang sangat bagus dan sangat membantu.

Dalam riset ini dikaji penggunaan Pymol untuk melihat purifikasi dan isolasi selektif spike protein. Kajian ini diterapkan pada salah satu varian sars-cov-2 yang saat ini sedang menjadi isi atau yang sedang trending topic di dunia. Riset ini bertujuan untuk Analisis Molekular dengan Pymol pada Purifikasi dan Isolasi Selektif Protein Spike Varian 6WZQ virus Sars–Cov–2.

2. Metode

Dalam penelitian ini, alat yang digunakan adalah komputer DESKTOP-Q0H3P52 dengan spesifikasi Windows 10 Pro dengan RAM 2,00 GB (1,88 GB usable) dengan prosesor Intel(R) Celeron(R) CPU N2840 @ 2.16GHz 2.16 GHz. *Software* yang digunakan adalah aplikasi Pymol dengan versi 2.5.2 yang dikembangkan oleh Schordinger dan situs protein data bank(PDB).

Riset ini dilakukan dengan beberapa tahapan sebagaimana terlihat pada skema dibawah ini.

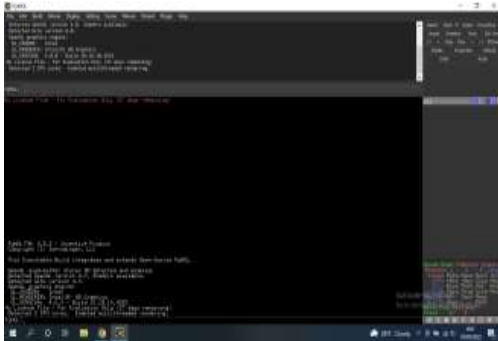


Gambar 1. Skema Riset Kajian

Struktur protein 6WZQ didownload pada <http://www.rscb.org> melalui aplikasi *google chrome*. Struktur protein 6WZQ akan dilakukan sterilisasi melalui aplikasi Pymol dengan cara memasukkan struktur ke dalam aplikasi melalui menu file kemudian pilih open dan pilih struktur yang sudah didownload. kemudian untuk melakukan pemurnian protein dari air maka langkah pertama yaitu remove water sedangkan untuk memurnikan protein dilakukan *preset>>ligand sites>>cartoon*. Struktur protein sudah murni dari air dan natif ligan yang menempel.

3. Hasil dan Pembahasan

Riset ini dilakukan dengan beberapa tahap, tahap pertama yang dilakukan adalah dengan menyiapkan alat dan bahan yang dibutuhkan pada pembahasan sebelumnya. Kemudian menyiapkan spike protein yang akan dimurnikan. Spike protein ini dapat di download pada situs <http://www.rscb.org/structure/6WZQ> Tampilan spike protein dan aplikasi Pymol dapat dilihat pada gambar 2a dan gambar 2b.



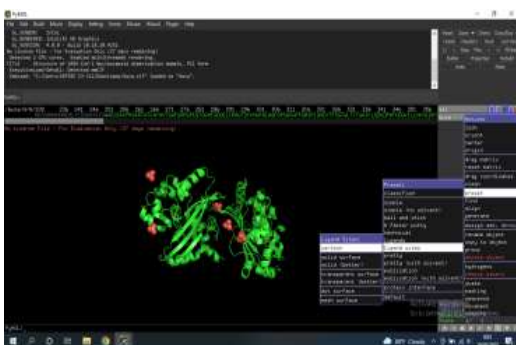
Gambar2a. Tampilan aplikasi Pymol protein 6WZQ



Gambar2b. Struktur spike

Gambar 2. Spike protein dalam Aplikasi Pymol

Langkah selanjutnya yaitu pemisahan air dan pengotor lain pada spike protein. Pemisahan ini dilakukan dengan mengklik A(Action) pilih *preset>>ligand sites>>cartoon*. Bagian data yang tidak memiliki nilai, maka data tersebut harus di hapus dengan cara di blok dan klik kanan dan pilih *remove*.



Gambar 3a. Struktur ligand dimurnikan



Gambar 3b. Struktur ligan yang

Gambar 3. Spike Protein (Istimewa)

Studi Molekular dengan Pymol pada Purifikasi dan Isolasi Selektif Protein Spike Varian 6WZQ Virus Sars–Cov–2 | 4

Hasil akhir dari penelitian ini berupa protein Sars-Cov-2 varian 6WZQ yang telah dimurnikan dari air, natif ligan dan pengotor lainnya. Hasilnya dapat dilihat pada gambar 6.



Gambar 4. Protein Murni (Istimewa)

4. Kesimpulan

Riset ini telah memperoleh hasil berupa pemurnian protein spike varian 6WZQ Sars-Cov-2 yang murni dari air dan pengotor lainnya. Hasil dari penelitian ini diperoleh visualisasi protein spike virus Sars-Cov-2 varian 6WZQ dalam bentuk struktur bebas air, struktur bebas pengotor lain dan struktur natif ligan.

Ucapan Terimakasih

Penulis mengucapkan terimakasih kepada jurusan Kimia prodi Pendidikan Kimia Universitas Negeri Padang yang telah mendukung penulisan artikel ini.

References