

ARTICLE

(Studi Komputasi Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7 Dwy dengan Pymol untuk Pemurnian dan Isolasi Selektif)

Tiara Kemeta^a, Siti Zaharani Zalamah^b, Mila Nabila^c

^aAgroekoteknologi, Fakultas Pertanian, Universitas Brawijaya, Malang, Indonesia

^bBiologi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

^cPendidikan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

email: milanabila333@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini mengkaji tentang komputasi protein spike Virus Sars-Cov-2 varian 7 Dwy dengan pymol untuk pemurnian dan isolasi selektif. Metode yang digunakan adalah studi komputasi menggunakan aplikasi pymol dengan spesifikasi perangkat yang digunakan versi 2.5.2. Aspek kajian dalam riset ini adalah pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang dipakai adalah spike protein Sars-Cov-2 varian 7DWY yang dapat didownload pada situs <https://www.rcsb.org/>. Analisis komputasi ini menggunakan perangkat komputer dengan spesifikasi Processor Intel(R) Core(TM) i5-7200U CPU @ 2.50GHz 2.71 GHz dengan RAM 8,00 GB (7,88 GB usable). Hasil dari riset ini diperoleh visualisasi protein spike virus Sars-Cov-2 Varian 7DWY dalam bentuk struktur bebas air, struktur bebas pengotor lain, dan struktur *native ligand*.

ARTICLE HISTORY

Submission: 6, April 2022

Revised: 20, Mei 2022

Accepted: 3, Juni 2022

Published: 5, Juni 2022

Citation:

Keywords: Komputasi, Aplikasi Pymol, Varian 7DWY, Pemurnian, Isolasi Selektif

1. Pendahuluan

Studi komputasi itu merupakan suatu bidang pembelajaran kimia yang menggunakan komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya. Dengan adanya studi komputasi ini, riset yang dilakukan dapat menghasilkan sekaligus menggambarkan bentuk protein murni. Studi komputasi digunakan untuk dapat mengatasi permasalahan dan ketidakmampuan teori kimia dalam bentuk struktur dan bentuk suatu molekul. Pada riset ini molekul yang dijelaskan adalah molekul protein. Namun, kenyataannya implementasi dari studi komputasi ini masih belum optimal baik pada penelitian maupun pada pembelajaran.

Berdasarkan hasil yang telah dilakukan, maka salah satu media komputasi yang sudah umum digunakan adalah HyperChem dan Avogadro. Dimana kedua aplikasi ini terbilang mudah digunakan karena sifatnya yang langsung bisa menunjukkan tampilan dari struktur yang akan dibuat. Struktur senyawa yang dihasilkan sangat jelas, serta didapatkan juga hasil gambar 3 dimensi. Selain aplikasi

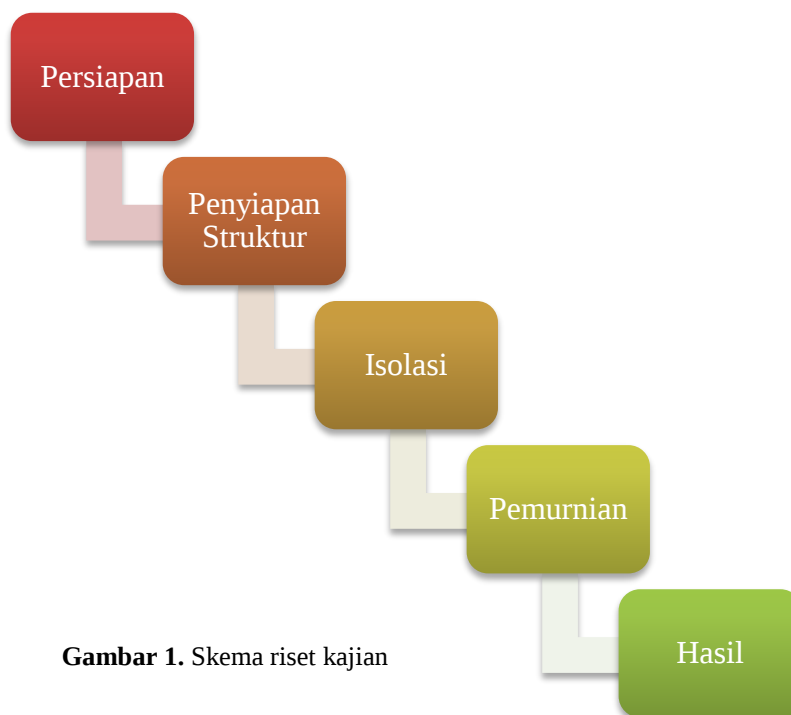
HyperChem dan juga Avogadro, ada juga aplikasi studi komputasi lain yaitu Pymol. Aplikasi ini merupakan program visualisasi molekul yang memberikan kualitas gambar 3 dimensi yang baik dari molekul yang dihasilkan.

Dalam riset ini dilakukan studi Komputasi Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7 Dwy dengan Pymol untuk Pemurnian dan Isolasi Selektif. Aplikasi ini digunakan untuk memurnikan spike protein Sars-Cov-2 yang belakangan ini sangat ramai dibicarakan. Pymol merupakan salah satu program visualisasi yang digunakan untuk memahami struktur molekul yang ditampilkan melalui gambar 3 dimensi. Tujuan dari riset ini adalah untuk menganalisis protein spike virus Sars-Cov-2 varian 7DWY dengan aplikasi pymol untuk pemurnian dan isolasi selektif dengan studi komputasi.

2. Metode

Perangkat yang digunakan adalah komputer dengan spesifikasi Processor Intel(R) Core(TM) i5-7200U CPU @ 2.50GHz 2.71 GHz dengan RAM 8,00 GB. Software yang digunakan adalah pymol versi 2.5.2 yang dapat diunduh pada website <https://pymol.org/>

Riset ini dilakukan dengan tahap-tahapan secara sistematis sebagaimana yang terlihat pada skema pada gambar 1.



Gambar 1. Skema riset kajian

Interpretasi visualisasi terhadap proses pemodelan molekul pada protein spike Sars-Cov-2 dapat diperoleh pada situs <https://www.rcsb.org/>. Pada kolom pencarian situs tersebut ketik “Sars Cov Virus” dan pilih protein spike virus yang ingin dimurnikan. Pada riset ini protein spike virus yang dipilih yaitu, spike virus Sars-Cov-2 varian 7DWY. Spike protein tersebut didownload dalam format CIF. Setelah spike protein didownload maka, spike protein tersebut sudah bisa digunakan dalam proses pemurnian menggunakan aplikasi pymol.



Gambar 2. Situs rscb.pdb



Gambar 3. Protein spike Virus-Sars-Cov-2 varian 7DWY

Struktur tersebut akan diisolasi dan dimurnikan melalui aplikasi Pymol dengan cara memasukkan struktur ke dalam aplikasi, kemudian tekan simbol (S) yang terdapat pada bagian kanan bawah aplikasi.

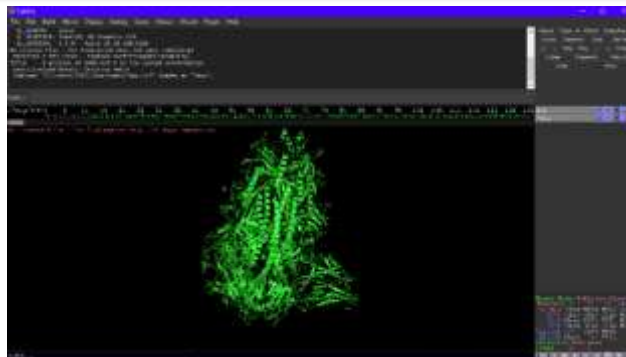
Pada proses pemurnian protein dari air, maka pilih bagian (A) lalu pilih *remove water*". spike protein yang sudah bebas air, kemudian dilakukan penghapusan ligan-ligan yang terputus dibagian paling kanan. Dengan cara pilih bagian (A) dan tekan "*preset > ligand site > cartoon*". Maka spike protein tadi sudah bebas dari air dan juga *native ligannya*".

3. Hasil dan Pembahasan

Hasil pencarian struktur protein 7DWY pada <https://www.rcsb.org/> menunjukkan bahwa protein tersebut belum dimurnikan yang mana dapat dilihat pada gambar 4. Pada gambar 4 spike protein varian 7DWY masih mengandung air yang ditandai dengan adanya titik-titik merah pada struktur protein tersebut.

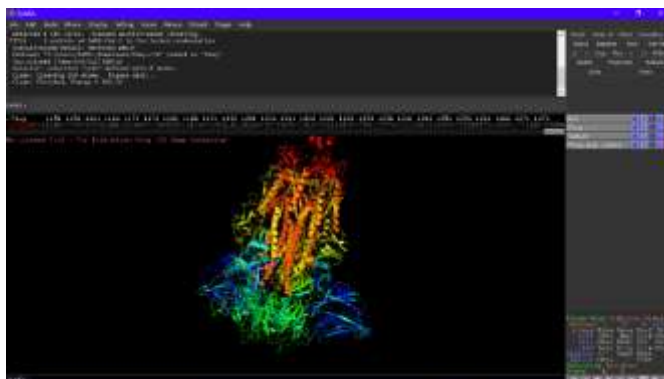


Gambar 4. Spike protein yang belum dimurnikan



Gambar 5. Spike protein setelah dilakukan “remove water”

Air yang berada pada protein tersebut dapat dihilangkan dengan menekan “remove water”, sehingga pada struktur protein akan bebas dari air. Kemudian spike protein tadi diubah menjadi model cartoon dengan cara, klik pada bagian (A) “*preset > ligand sites > cartoon*”. Untuk natif ligan yang terdapat pada spike protein tadi dihilangkan dengan “*me-remove*” huruf yang terpisah pada bagian kanan, sehingga nanti akan didapatkan spike protein murni yang terlihat pada gambar 6. Spike protein yang telah diisolasi dan dimurnikan disimpan dalam format PDB.



Gambar 6. Spike protein yang sudah dimurnikan

4. Kesimpulan

Riset ini berhasil mendapatkan protein varian 7DWY murni yang bebas air, natif ligan, dan pengotor lainnya. Hasil dari riset ini diperoleh visualisasi protein spike virus Sars-Cov-2 Varian 7DWY dalam bentuk struktur bebas air, struktur bebas pengotor lain, dan struktur natif ligan. Penelitian lanjutan dapat dilakukan pada tahapan interaksi molekul secara dinamis.

Acknowledgements

References