

ARTIKEL

Implikasi Pymol pada Teknik Pemurnian dan Isolasi Protein Varian Spike Virus Sars-Cov2 Varian 7R98

Dwi Kartika¹, Fitra Hanis Daniah², Yulinda Sari³

¹Keperawatan, fakultas keperawatan ilmu kedokteran, Universitas Negeri Jambi, jambi, Indonesia

²Matematika, Universitas Islam Negeri Sultan Thaha Saifuddin, Jambi, Indonesia

³Pendidikan Kimia, fakultas matematika dan ilmu pengetahuan alam, Universitas Negeri Padang, Padang Utara, Sumatera Barat 25171, Indonesia

*Corresponding email: syulinda168@gmail.com

ABSTRAK

Tujuan dari riset ini adalah mengkaji pemurnian dan isolasi protein varian Spike Virus Sars-Cov2, melalui metode kajian komputasi dengan menggunakan aplikasi Pymol versi 2.5.2 yang dikeluarkan oleh perusahaan schrodinger LLC. Aspek kajian dalam riset ini adalah pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang dipakai adalah varian spike virus sars-cov2. Analisis komputasi menggunakan perangkat keras komputer dengan spesifikasi prosesor intel(R) Celeron(R) CPU N3350 @ 1.10GHz 1.10 GHz dengan RAM 2,00 GB. Hasil ini didapat dari varian yang diisolasi dan dimurnikan adalah spike protein sars-cov2 7R98

ARTICLE HISTORY

Submission: 4 April 2022

Received: 21 Mei 2022

Accepted: 2 Juni 2022

Citation: Dwi kartika, Fitra Hanis Daniah, Yulinda sari. (2022). Jurnal MATH-SMART. Volume 1 no 1 Halaman 1-14

Keywords: Aplikasi Pymol, Pemurnian, Isolasi selektif, Protein varian 7R98

1. Pendahuluan

Ilmu komputasi adalah salah satu ilmu yang penting dalam pembelajaran kimia. Studi komputasi merupakan bidang ilmu yang mempunyai perhatian pada penyusunan model matematika dan teknik penyelesaian numerik serta penggunaan komputer untuk menganalisis dan memecahkan masalah-masalah ilmu (sains). Dalam penggunaan praktis, biasanya berupa penerapan simulasi komputer atau berbagai bentuk komputasi lainnya untuk menyelesaikan masalah-masalah dalam berbagai bidang keilmuan, tetapi dalam perkembangannya digunakan juga untuk menemukan prinsip-prinsip baru yang mendasar dalam ilmu. Namun kenyataannya hingga saat ini penggunaan ilmu komputasi masih terbatas dan belum maksimal.

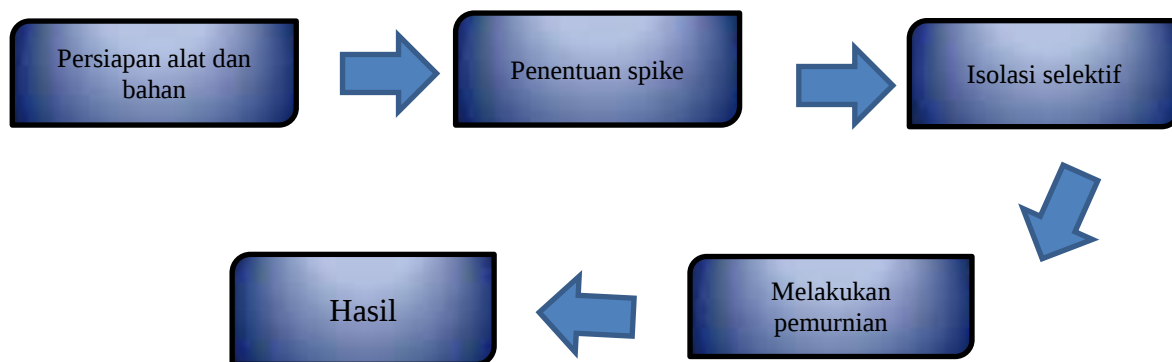
Berdasarkan beberapa hasil penelitian, sudah banyak peneliti yang menggunakan studi komputasi dalam penelitian nya. Berbagai aplikasi yang sering digunakan oleh peneliti diantaranya aplikasi Hyperchem, Chemdraw, Avogadro, Pymol dan masih banyak lagi aplikasi lainnya. Chemdraw merupakan salah satu fitur dari ChemOffice yaitu salah satu produk dari raksasa perusahaan bidang kimia Perkin Elmer dan Cambridge Software yang memiliki berbagai fitur dalam menggambar struktur molekul serta berbagai fitur yang sangat menarik yang akan membuat metode pembelajaran. Namun implementasi molekuler dan permodelan dalam pemurnian dan isolasi selektif pada sipke varian ini masih belum banyak dan optimal sehingga hasilnya pun masih terbatas mengenai pengetahuan kajian ini.

Berdasarkan penjelasan di atas riset ini mengkaji tentang penggunaan aplikasi pymol untuk melihat implikasi dalam pemurnian dan isolasi selektif spike protein. Pada riset ini di kaji salah satu varian sars-cov2 yang belakangan ini menjadi isu yang hangat di dunia. Tujuan dari riset ini adalah untuk mengkaji pemurnian dan isolasi protein varian spike virus sars-cov2 varian 7R98 menggunakan aplikasi pymol.

2. Metode

Dalam penelitian ini perangkat yang di gunakan adalah komputer DESKTOP-QBK1N2O. Dengan spesifikasi windows 10 pro, dengan prosessor intel(R) Celeron(R) CPU N3350 @ 1.10GHz 1.10 GHz dengan RAM 2,00 GB. 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 tahapan tahapan secara sistematis sebagaimana terlihat pada skema. Skema dalam riset ini adalah:



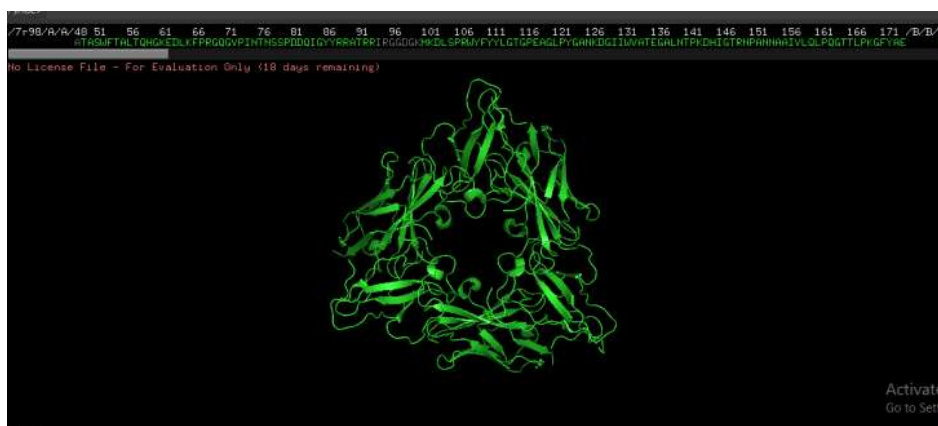
Gambar 1 Skema riset kajian

Struktur protein 7R98 di donwload pada <https://www.rcsb.org> melalui aplikasi google chrome. Struktur protein 7R98 akan dilakukan sterilisasi melalui aplikasi Pymol dengan cara memasukan struktur ke dalam aplikasi melalui menu file, kemudia pilih open dan pilih struktur yang sudah di donwload , lalu tekan tombol S pada sebelah kanan bawah aplikasi.

Kemudian untuk melakukan permunian protein dari air, maka langkah yang dilakukan adalah pilih bagian (A) pada kanan aplikasi lalu tekan remover water. Sedangkan untuk memurnikan protein , maka pilih bagian (A) dan tekan preset lalu klik ligan sites lalu cartoon. Struktur protein 7R98 telah murni dari air dan natif ligan yang menempel . hasil struktur dapat disimpan dalam format “PDB” dengan cara klik file lalu export molecu, file dapatdisimpan dengan nama “spike_7R98_nama” dan pilih format PDB lalu save.

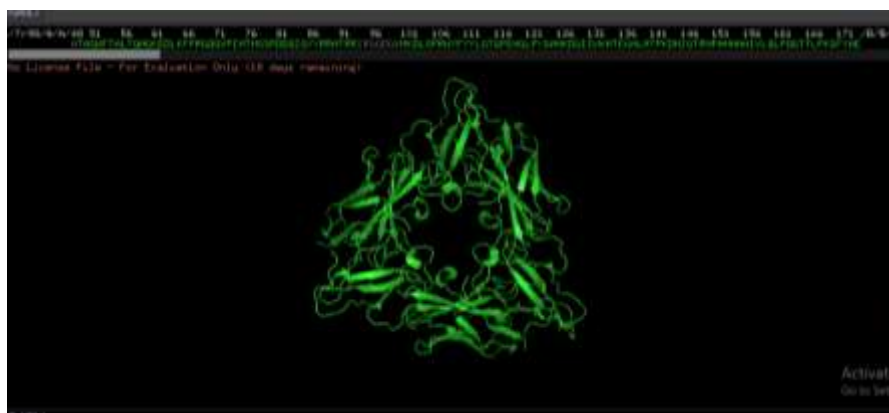
3. Hasil dan pembahasan

Struktur protein 7R98 yang didonwload dari <https://www.rscb.org> merupakan protein yang belum murni. Struktur tersebut masih mengandung banyak air denagn adanya angka 0000 berwarna merah dibagian ligan dan titik merah pada struktur protein, seperti yang terlihat pada gambar 2 berikut



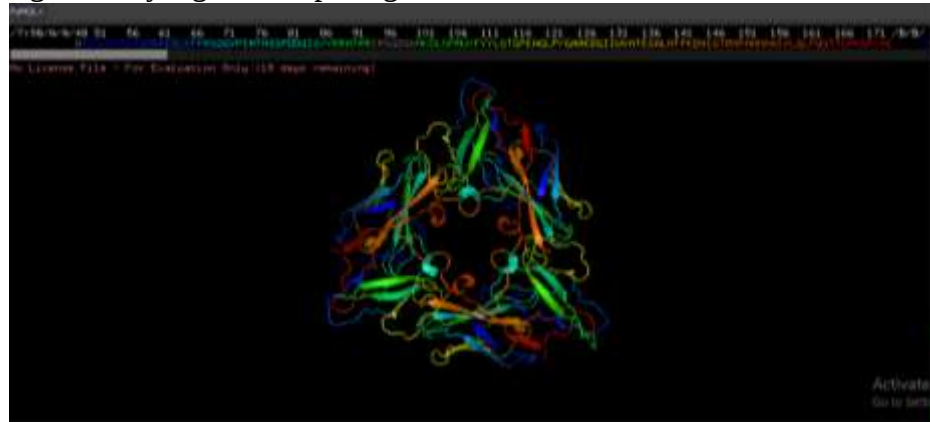
Gambar 2 Struktur awalprotein 7R98 pada aplikasi pymol

Menghilangkan Air yang menempel pada protein dilakukan dengan cara menekan *remove water*. Sehingga titik merah pada struktur dan angka pada ligan sudah hilang. Sebagaimana yang terlihat pada gambar 3



Gambar 3 Struktur murni dari air protein 7R98 pada aplikasi Pymol

Sedangkan untuk memurnikan protein, maka pilih bagian (A) dan tekan *preset* lalu klik *ligand sites* lalu *cartoon*. Struktur protein 7R98 telah murni dari air dan natif ligan yang menempel. Sebagaimana yang terlihat pada gambar 4 berikut



Gambar 4 struktur dalam bentuk *cartoon* pada aplikasi pymol

Kemudia protein yang sudah dimurnikan dan isolasi sudah bisa disimpan dengan format PDB.

4. Kesimpulan

Pada penelitian ini protein 7R98 sudah didapatkan dalam keadaan murni dari air, natif ligan, dan pengotor lainnya menggunakan aplikasi Pymol. Struktur pertama sebelum dilakukan pemurnian struktur hanya berwarna hijau, namun setelah diubah dalam bentuk *cartoon* struktur berubah menjadi berwarna. Riset ini akan digunakan untuk validasi di laboratorium.

References