

ARTICLE

(Penggunaan Aplikasi PyMol dalam Proyeksi Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7JZN pada Aspek Pemurnian dan Isolasi Selektif)

Marzuq Adil.R ^a, Indryani Saputri ^b, Yana Lendarwati ^c

^a Program Studi Statistika, Universitas Diponegoro, Semarang, Indonesia

^b Program Studi Biologi, Universitas Bengkulu, Indonesia

^c Program Studi Pendidikan Kimia, Universitas Negeri Padang, Indonesia

Email: yanalendarwati67491@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan untuk mengkaji penggunaan aplikasi PyMol dalam proyeksi protein spike virus Sars-Cov-2 varian 7JZN pada aspek pemurnian dan isolasi selektif. Riset ini menggunakan metode studi pemodelan dengan penggunaan aplikasi PyMol versi 2.5.2 Schrodinger. Riset ini memiliki dua kajian yaitu pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang dipakai adalah varian spike virus Sars-Cov-2 yang disiapkan dan kemudian dipilih dari web online www.pdb.rscb. Analisis komputasi menggunakan perangkat computer dengan spesifikasi DESKTOP-4M4AR59 dengan RAM 4.00 GB. Hasil yang didapatkan varian yang dimurnikan dan diisolasi adalah spike virus spike Sars-Cov-2 varian 7JZN. Diperoleh protein varian 7JZN yang berbentuk visualisasi remove waters dan visualisasi ligand. Pemurnian dan isolasi selektif varian 7JZN berhasil dipisahkan air dan pengotor lain pada protein target.

ARTICLE HISTORY

Submission: 05 April 2022

Revised: 22 Mei 2022

Accepted: 02 Juni 2022

Published: 05 Juni 2022

Citation:

Keywords: Pymol, Sars-Cov-2, 7JZN, Pemurnian, Isolasi

1. Pendahuluan

Studi komputasi adalah studi yang sangat penting dalam kimia. Studi komputasi ini berhubungan dengan computer dan perhitungan dalam kimia. Kimia komputasi adalah sebuah cabang ilmu yang berlandaskan hasil kimia teori yang akan diterjemahkan dalam computer menggunakan aplikasi untuk menghitung bagaimana sifat dan perubahan suatu molekul. Namun pada kenyataannya masih banyak juga mahasiswa yang belum menggunakan studi komputasi ini sebagai alternative utama.

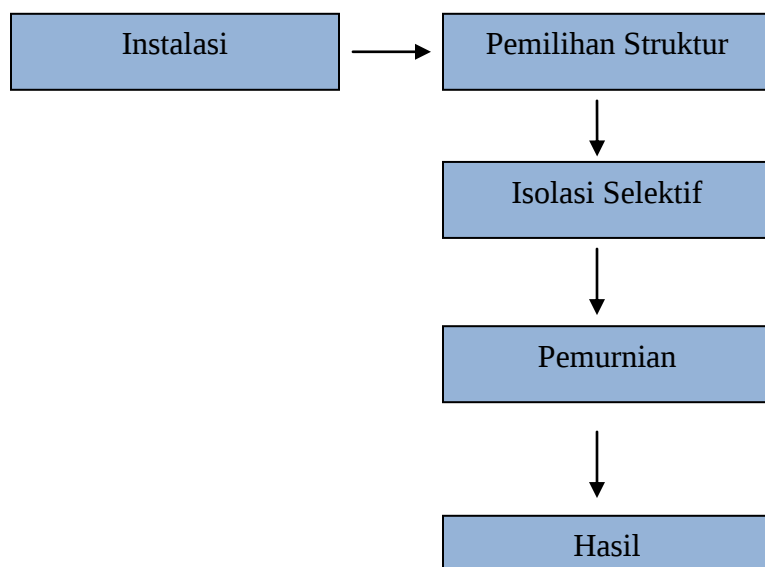
Berdasarkan hasil riset dalam komputasi dan pemodelan ini bisa menggunakan beberapa aplikasi yang dapat membantu dalam pengerjaan pemodelan, diantaranya aplikasi PyMol, Hyperchame dan Chemdraw. Aplikasi PyMol adalah alat visual satu dari sedikit model yang yang digunakan untuk pemurnian dan isolasi molekul (Santoso,2019). Hyperchame adalah aplikasi yang digunakan dalam pemodelan molekul, membuat struktur, dan menghitung energy molekul (Hasibuan,2020). Sedangkan

aplikasi Chemdraw adalah aplikasi yang tidak jauh berbeda dengan aplikasi hyperchame yang gunanya untuk membuat visualisasi molekul(Paramita dkk,2020)

Dalam riset ini dikaji penggunaan aplikasi pymol dalam proyeksi protein spike virus sars-cov-2 varian 7jzn pada aspek pemurnian dan isolasi selektif. Kajian itu diterapkan pada varian virus Cov 2 yang pernah secara besar besaran melanda dunia khususnya Indonesia. Riset ini bertujuan untuk mengkaji penggunaan aplikasi PyMol dalam proyeksi protein spike virus Sars-Cov-2 varian 7JZN pada aspek pemurnian dan isolasi selektif.

2. Metode

Perangkat yang digunakan adalah laptop dengan device name DESKTOP-4M4AR59, processor A4-9120 RADEON R3, 4 COMPUTE CORES 2C+2G 2.20 GHz. Laptop ini memiliki RAM sebesar 4.GB. Edition Windows 10 Home dengan versi 21H1. Software yang digunakan adalah aplikasi PyMol versi 2.5.2 Schrodinger dan situs protein pada website <https://www.rcb.org/structure/7JZN> yang akan dilakukan seperti gambar 1.



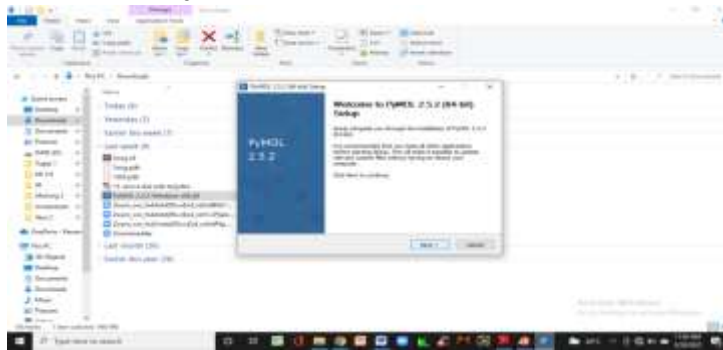
Gambar 1. Skema Kerja

Tahap dari instalasi aplikasi PyMol ini dilakukan dengan mengikuti perintah pada saat penginstalan aplikasi. Dalam pemilihan struktur dapat dipilih dan didownload pada website <https://www.rcsb.pdb> yang akan diisolasi selektif menggunakan PyMol dengan mengklik A, lalu pilih remove waters. Lalu dalam pemurnian dari pengotor dengan cara menghilangkan NAG setelah ,mengklik all (A)-preset-ligand sites-cartoon. Setelah dilakukan hal tersebut maka akan didapatkan hasil dari isolasi dan pemurnian.

3. Hasil dan Pembahasan

PyMol adalah aplikasi yang digunakan dalam memvisualkan molekul kecil dan makromolekul seperti protein. Gambar yang dihasilkan dalam bentuk 3D dengan struktur berwarna. PyMol digunakan juga dalam pemurnian dan isolasi selektif spike sars cov 2. Dalam penggunaannya PyMol harus

didownload dan diinstalasi terlebih dahulu sebelum digunakan. PyMol versi 2.5.2 Schrodinger ini sangat mudah dalam instalasinya.



Gambar 2 instalasi Aplikasi PyMol

PyMol dapat di download melalui website google saja, dengan mengetikkan “download PyMol” pada kolom ketik dan akan tampak pilihan paling atas dan ikuti saja langkah langkah yang tertera digoogle tersebut. Setelah terdownload maka PyMol dilakukan penginstalan dengan tujuan agar aplikasi dapat digunakan. Instalasi ini sangat mudah dilakukan dan tidak seperti aplikasi visual yang lain dengan langkah yang rumit dan banyak. Tahap selanjutnya akan dilanjutkan seperti pada gambar 3.



Gambar 3. Pencarian Spike Virus Sars Cov 2

Penggunaan PyMol ini tidak akan dapat digunakan ketika belum adanya Spike sars virus cov-2. Maka dari itu diperlukannya download spike virus cov-2 . Dalam website tersebut banyak ditampilkan varian virus sars cov 2-. Pada riset ini spike virus yang digunakan adalah varian 7JZN , tampilannya seperti gambar 4.

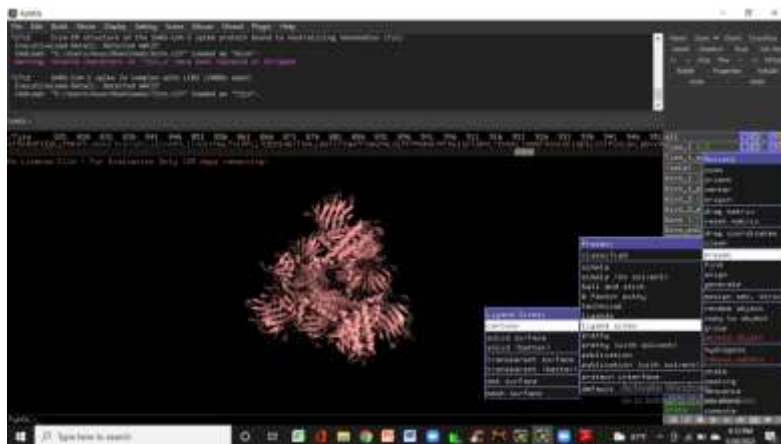


Gambar 4. Spike Virus Sars cov 7JZN

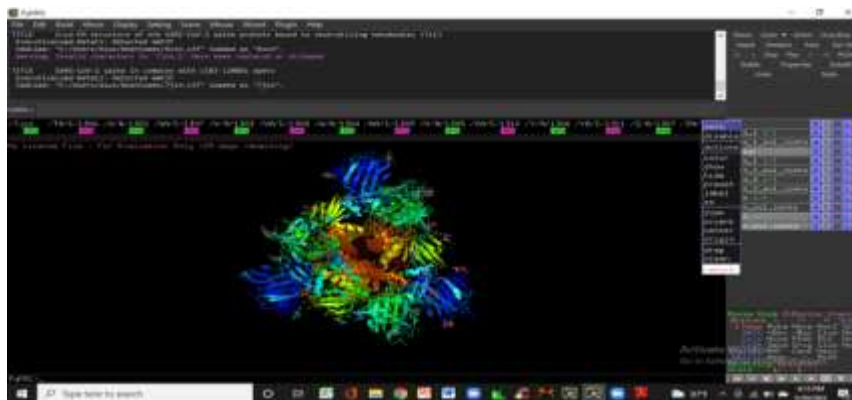
Dalam pemurnian dan isolatif seleksi protein, spike yang sudah didownload maka harus dimasukkan kedalam aplikasi PyMol dalam tahapan pemurnian. Pada tampilan awal spike virus seperti

gambar 5. Hasil pencarian ini menunjukkan belum murninya spike yang didownload. Struktur protein mengandung air yang tampak berwarna merah pada bagian ligand dan titik titik merah pada struktur protein.

Air yang menempel dapat dihilangkan dengan remove water, ini dilakukan dengan mendrag atau memblok tulisan NAG dan dihapus secara perlahan sampai habis. Setelah dilakukan penghapusan tersebut maka didapatkanlah gambar visual spike virus sars cov-2 varian 7JZN dalam bentuk murni. Hasil pemurnian tersebut menunjukkan air yang menempel sudah hilang, seperti tampilan gambar 6. Pemurnian dan isolasi ini dibuktikan sudah murni dengan melihat warna yang berbeda dari kedua tampil awal dan akhir.



Gambar 5 Tampilan protein belum murni



Gambar 6. Struktur protein varian 7JZN sudah murni

4. Kesimpulan

Diperoleh hasil dari riset ini protein dengan varian 7JZN yang murni dari air, pengotor lainnya dan natif ligan. Protein murni ini ditandai dengan hilangnya titik merah pada struktur molekul dan sempurna dari segi warna dan bentuk dari protein yang menjadi target. Maka riset ini dapat disimpulkan berhasil dengan menggunakan aplikasi PyMol.

Ucapan Terimakasih

Puji syukur kepada Allah dengan rahmat-Nya penulis dapat menyelesaikan article ini. Terimakasih penulis ucapan kepada orang tua atas dukungan yang diberikan sehingga penulis dapat dengan sungguh-sungguh membuat article ini. Terimakasih juga kepada teman teman yang sudah memberikan semangat dan juga motivasi selama penulisan artikel ini.