

## ARTICLE

### **Analisis *Molecular Docking* Senyawa Aktif 2-Methyl-2-Phytyl-6-Crhomanol dari Tanaman *Aloe Vera* dengan Protease 7djr Menggunakan PyMOL dan PyRX**

Machmudah<sup>1</sup>, Yoni Afrilia<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Faculty of Methematic and Natural Science, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Faculty of Methematic and Natural Science, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

\*email: [afriyaiyoni29@gmail.com](mailto:afriyaiyoni29@gmail.com)

#### **ABSTRACT**

Eksperimen ini bertujuan untuk menganalisis interaksi senyawa aktif 2-Methyl-2-Phytyl-6-Crhomanol dari tanaman *Aloe Vera* dengan protease Sars-CoV-2 varian 7djr. Metode yang digunakan yaitu aplikasi PyMOL versi 2.5.2 dan PyRx versi 0.8 (python.exe) 32 Bit. Kajian ini dilakukan dengan mengobservasi struktur 3D molekul dan interaksi ligan-protein yang digunakan. Perangkat yang digunakan yaitu prosesor Intel Celeron N4000, up to 2,6 GHz, Ram 4 GB, Windows 11 Home Single Language 64-bit sebagai system operasi. Screening molekul aktif menggunakan situs Dr.Duke ([www.phytochem.com](http://www.phytochem.com)) dan senyawa aktifnya didapatkan dari pubchem ([www.pubchem.com](http://www.pubchem.com)). Hasil dari eksperimen ini adalah senyawa aktif dengan SMILES CC1=CC(=CC=C10)CC=C(C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)O.

Protese 7djr juga berhasil dimurnikan dengan PyMOL. Hasil *docking* didapatkan nilai *Binding Affinity* yaitu -5,8ev; -5,6ev; -5,5ev; -5,4ev; -5,3ev; -5,2ev dengan RMSD 0; 1,411; 1,584; 17,506; 18,316; 18,792 untuk *Lower Bound* dan RMSD 0; 2,987; 3,906; 20,384; 20,797; 21,369; untuk *Upper Bound*.

#### **ARTICLE HISTORY**

**Submission: 4 Mei 2022**

**Recevid: 23 Mei 2022**

**Accepted: 13 Juni 2022**

**Publish : 14 Juni 2022**

#### **Citation:**

**Keywords:** PyMOL, PyREX, *Aloe Vera*, Varian 7 djr, Sars-CoV-2

## **1. Introduction**

Tanaman *Aloe vera* merupakan tanaman yang sangat mudah ditemui di Indonesia. Tanaman *Aloe vera* sudah sangat mudah ditemui dimana saja, biasanya digunakan sebagai tanaman hias dan juga tanaman obat. *Aloe vera* juga mempunyai banyak manfaat, sehingga orang banyak memelihara tanaman ini.

*Aloe vera* mengandung berbagai komposisi yang bermanfaat sebagai penjaga kelambaban kulit, penyubur rambut, *antiseptic*, antioksidan dan anti penuaan dan berbagai fungsi lainnya. Lidah buaya dapat berperan sebagai antioksidan alami karena mengandung beberapa vitamin dan mineral, seperti, vitamin C, vitamin A, vitamin E, magnesium, dan senyawa metabolit sekunder, seperti antrakuinon, lignin, tannin, saponin,sterol dan flavonoid.

Namun, belum begitu banyak dijumpai riset mengenai tanaman ini. Oleh karena itu, riset ini bertujuan untuk menganalisis hubungan protease Sars-CoV-2 varian 7djr dengan senyawa aktif 2-Methyl-2-Phytyl-6-Crhomanol

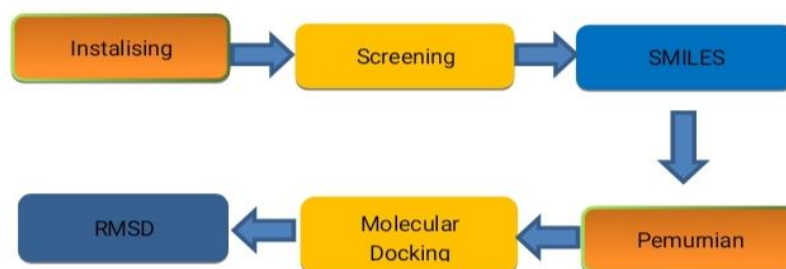
menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx dengan metode *molecular docking* sehingga didapatkan nilai *Binding Affinity* dan RMSD.

## 2. Metode

### Persiapan

Senyawa aktif diambil dari situs Dr.Duke ([www.phytochem.com](http://www.phytochem.com)). SMILES molekul diperoleh dari pubchem ([www.pubchem.com](http://www.pubchem.com)). Uji komputasi ini dilakukan menggunakan laptop prosesor Intel Celeron N4000, up to 2,6 GHz, Ram 4 GB, Windows 11 Home Single Language 64-bit dengan *software* PyMOL2.5.2 dan PyRxversi 0.8 (python.exe) 32 Bit.

### Pelaksanaan



**Gambar 1.** Skema(Courtesy/Yoni Afrilia)

Pelaksanaan riset dimulai dengan instalasi dilakukan instal aplikasi PyMOL dan PyRx. Kemudian screening molekul aktif menggunakan situs Dr.Duke. Setelah itu dilakukan pencarian SMILES senyawa aktif menggunakan situs pubchem. Dilanjutkan dengan pemurnian molekul dengan aplikasi PyMOL dan setelah dimurnikan dilakukan *molecular docking* dengan aplikasi PyRx sehingga diperoleh *Binding Affinity* dan RMSD.

### Evaluasi

Hasil Visual gambar protease 7djr yang diambil dan dibaca sesuai dengan gambaran yang dilakukan. Data *Binding Affinity* dihubungkan dan dilihat kecenderungannya.

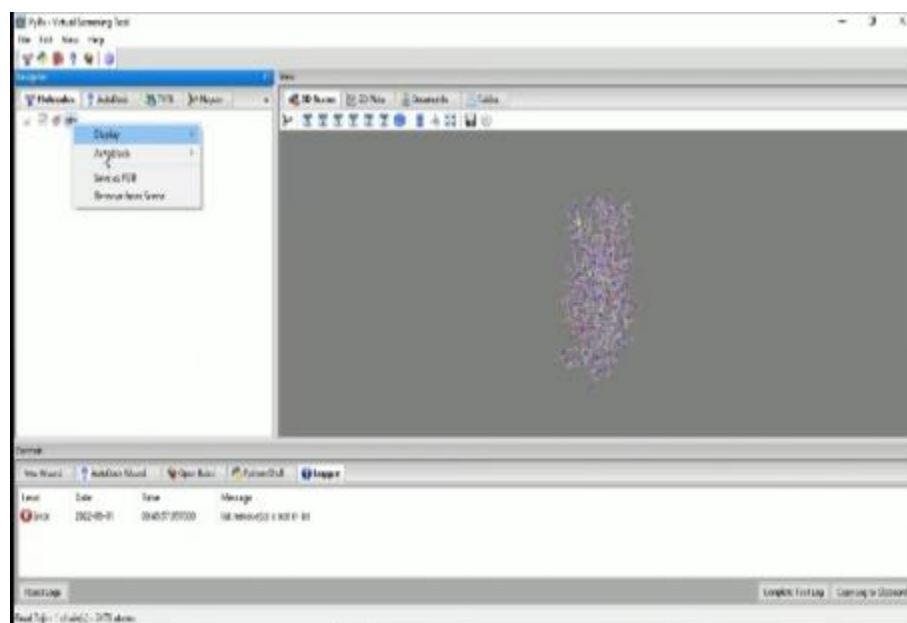
## 3. Hasil dan diskusi

Pemurnian protein yaitu protease dari SARS-CoV-2 Omicron Variants S 7djr berhasil disiapkan menggunakan aplikasi PyMOL. Protease bersih dari air dan ligan. Keunggulan ini telah berhasil digunakan untuk melakukan docking molekuler dengan program Pyrx sebelumnya. Seperti yang ditunjukkan pada gambar di bawah:



**Gambar 2.** protease varian 7djr steril (Courtesy /Yoni Afrilia)

*Molekular docking* bertujuan meniru peristiwa interaksi suatu molekul ligan dengan protease yang menjadi targetnya pada uji ini. *Molekular docking* dilakukan dengan menggunakan aplikasi Pyrex untuk mendapatkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. Hasil *docking* antara ligan dengan reseptor diperoleh dari konformasi ligan dengan energi paling kecil.

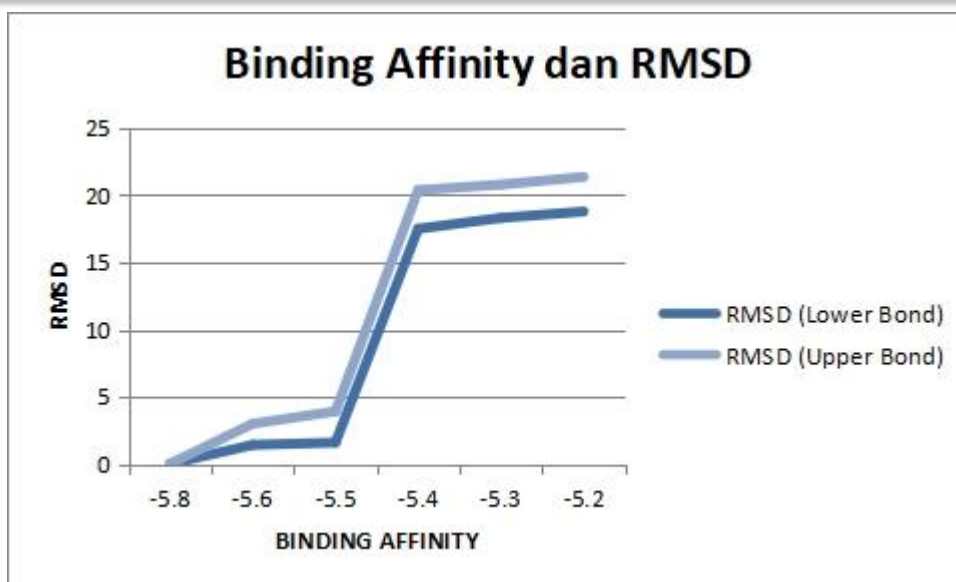


**Gambar 3.** *Molekular Docking* (Courtesy /Yoni Afrilia)

**Tabel 1.** Nilai energi afinitas ikat ligan asli dan senyawa obat yang diuji

| ligand                    | Binding Affinity<br>(kkal/mol) | RMSD (Lower<br>Bond) | RMSD (Upper<br>Bond) |
|---------------------------|--------------------------------|----------------------|----------------------|
| 7djr_9865117_uff_E=250.52 | -5,8                           | 0,0                  | 0,0                  |
| 7djr_9865117_uff_E=250.52 | -5,6                           | 1,411                | 2.987                |
| 7djr_9865117_uff_E=250.52 | -5,5                           | 1,584                | 3.906                |
| 7djr_9865117_uff_E=250.52 | -5,4                           | 17.506               | 20.384               |
| 7djr_9865117_uff_E=250.52 | -5,3                           | 18,<br>316           | 20.797               |
| 7djr_9865117_uff_E=250.52 | -5,2                           | 18,<br>792           | 21.369               |

Dari tabel dan grafik di atas dapat dilihat bahwa semakin kecil nilai RMSD, maka nilai *binding affinity* semakin besar begitupun sebaliknya. Sebagaimana dapat dilihat pada grafik berikut :



**Gambar 4.** Grafik *Binding Affinity* vs RMSD (Courtesy/ Yoni Afrilia)

#### 4. Kesimpulan

Pemurnian dan *molecular docking* dengan senyawa aktif 2-Metil-2-Phytyl-6-Cromanol dengan Protease SARS-CoV-2 Varian 7djr menggunakan aplikasi PyMol dan PyRx telah berhasil dilakukan. Hasil uji menggunakan PyRx terdapat hubungan antara nilai RMSD dengan *Binding Affinity* yaitu semakin besar RMSD semakin kuat *Binding Affinity*. Rata-rata *Binding Affinity* yang diperoleh adalah 5,42 kkal/mol. Penelitian lanjutan perlu dilakukan untuk memvalidasi secara laboratorium.