

ARTICLE

Interaksi Molekular *Alpha Trocophenol* dari *Cocos Nucifera* dengan Protease 7K0E Varian SARS-Cov-2

Aulia Rahman^{1a}, Nur'ani^b, Nailatul Fadhilah^{3*}

^aDepartment of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Sciences, Universitas Diponegoro, Semarang, Indonesia.

^bDepartment of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Sciences, Universitas Diponegoro, Semarang, Indonesia.

^cDepartment of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Sciences, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia.

*Corresponding email: nailatulfadhilaah@gmail.com

ABSTRAK

Tujuan riset ini untuk meninjau interaksi molekular *Alpha Trocopherol* dari *Cocos Nucifera* dengan Protease 7K0E virus SARS-COV-2. Metode yang digunakan pada riset ini yaitu perhitungan secara komputasi menggunakan aplikasi EduPyMOL- Versi 1.7.4.5-Win32.msi dan PyRx versi PyRx version 0.8 (python.exe) 32 Bit. Kajian dilakukan dengan mengobservasi konversi 3D pada ligand yang digunakan. Perangkat yang digunakan untuk riset ini prosesor AMD Dual Core V5-471G 1.8GHz, RAM 4GB. *Screening* molekul aktif menggunakan situs <https://phytochem.nal.usda.gov/>. Senyawa aktif didapatkan dari situs <http://www.pubchem.com/>. Hasil eksperimen ini didapatkan senyawa aktif dengan CC1=C(C2=C(CC[C@@](O2)(C)CCC[C@H](C)CCC[C@H](C)CCCC(C)C(=C1O)C)C. Protease 7K0E juga berhasil dimurnikan dengan PyMOL. Hasil *docking* didapatkan nilai *Binding Affinity* (kkal/mol) untuk masing-masing RMSD yaitu -5,9 dan -5,7. Sementara RMSD (*Upper Bond*) masing-masing 0,0 dan 0,868 dan RMSD (*Lower Bond*) masing-masing 0,0 dan 2,562.

ARTICLE HISTORY

Submission: 4 Mei 2022

Received: 23 Mei 2022

Accepted: 4 Juni 2022

Citation: Aulia Rahman, Nur'aini, Nailatul Fadhilah
Astro-Smart Vol 1 nomor 1 hal 1-5

Keywords: PyMol, Pyrx, *Alpha Trocopherol*, SARS-COV-2.

1. PENDAHULUAN

Tanaman kelapa (*Cocos Nucifera*) merupakan salah satu tanaman yang memiliki berbagai khasiat. Bagian tanaman ini, yang sering digunakan adalah daging kelapa. Daging kelapa diproses sebagai minyak kelapa. Minyak kelapa mengandung *D-alpha Trocopherol* yang memiliki manfaat untuk meningkatkan kesehatan kulit, mata, sel darah, otak dan kesuburan reproduksi. Namun, penelitian mengenai manfaatnya masih belum optimal.

Berdasarkan riset ini, *software* PyMOL digunakan untuk menunjukkan tampilan dari struktur yang hendak kita teliti dengan jelas. Aplikasi ini merupakan program visualisasi molekul yang memberikan kualitas gambar 3D yang baik dari molekul yang kita teliti. Pada riset ini dilakukan pemurnian Protease SARS-CoV-2 *Omicron* varian 7K0E.

Dalam riset ini dilakukan analisis hubungan protease dengan senyawa aktif menggunakan PyRx dengan metode *Molecular Docking* sehingga menghasilkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. Tujuan riset ini adalah untuk menganalisis interaksi senyawa aktif *Alpha Tocopherol* dari tanaman kelapa (*Cocos Nucifera*) dengan protease Sars-CoV-2 varian 7K0E menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx.

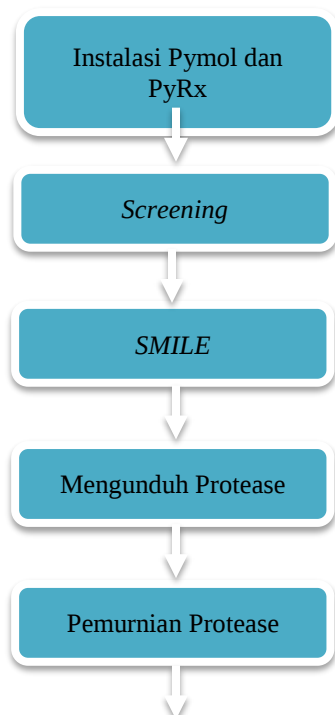
Pada riset ini sangat memerlukan studi komputasi. Studi komputasi dapat menjelaskan bentuk dan struktur molekul protein yang mana hal tersebut tidak dapat dilakukan melalui teori saja. Namun, kimia komputasi ini belum terlalu optimal untuk digunakan pada suatu penelitian atau pembelajaran.

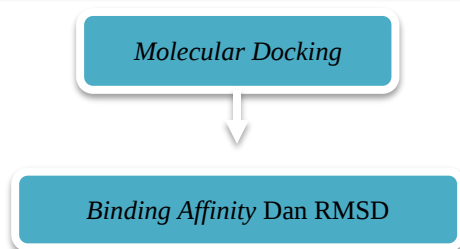
2. METODE

2.1 Persiapan

Screening molekul aktif menggunakan situs <http://www.phytochem.nal.usda.gov/>. Protease 7Ike protein sarscov_2 dengan format *FASTA* diperoleh dari PDB (<https://www.rcsb.org>). Struktur 3D dan *SMILE* molekul diperoleh dari simulasi permodalan Pubchem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>) dengan format SDF. Pemurnian protease 7Ike dilakukan melalui software PyMol 2.5.2 version (Schrödinger, Inc., USA) *with an academic license*. Dan *Molecular Docking* dengan software PyRx. Perangkat keras yang digunakan ber spesifikasi Intel Core I5 7th Gen, AMD Dual Core V5-471G 1.8GHz, RAM 4GB.

2.2 Pelaksanaan





Gambar 1. Skema (Courtesy/Nailatul Fadhillah)

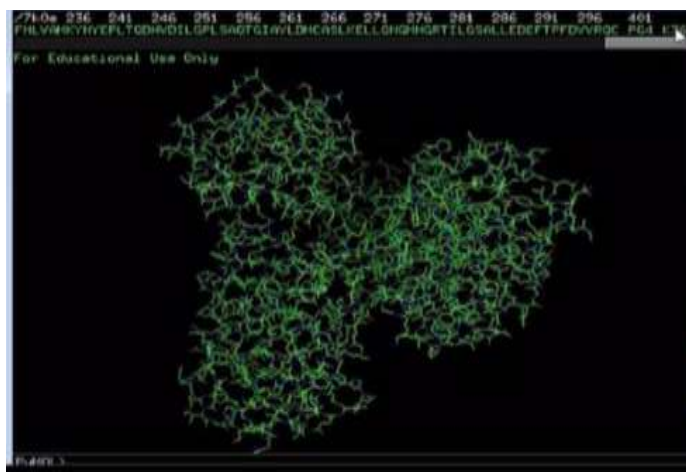
Pelaksanaan riset dimulai dengan menginstal aplikasi PyMOL dan PyRx, kemudian *screening* molekul aktif menggunakan situs Dr. Duke. Setelah itu dilakukan pencarian *SMILES* senyawa aktif menggunakan situs Pubchem. Dilanjutkan dengan pemurnian molekul dengan aplikasi PyMOL dan setelah dimurnikan dilakukan *Molecular Docking* dengan aplikasi PyRx sehingga diperoleh *Binding Affinity* dan RMSD.

2.3 Evaluasi

Visual gambar Protease 7K0E yang sudah steril diperoleh dari aplikasi PyMOL. Sementara itu, data angka *Binding Affinity* dan RMSD diperoleh dari aplikasi PyRx. Nilai RMSD dan *Binding Affinity* dihubungkan untuk menentukan jarak dan tarikan antara molekul aktif dan protease.

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Protease yang belum dimurnikan biasanya mengandung pengotor berupa air yang ditandai dengan adanya bercak-bercak merah dan *native ligand*, sehingga dilakukan pemurnian menggunakan aplikasi PyMOL.



Gambar 2. Protease yang telah disterilkan (Courtesy/Nailatul Fadhillah)

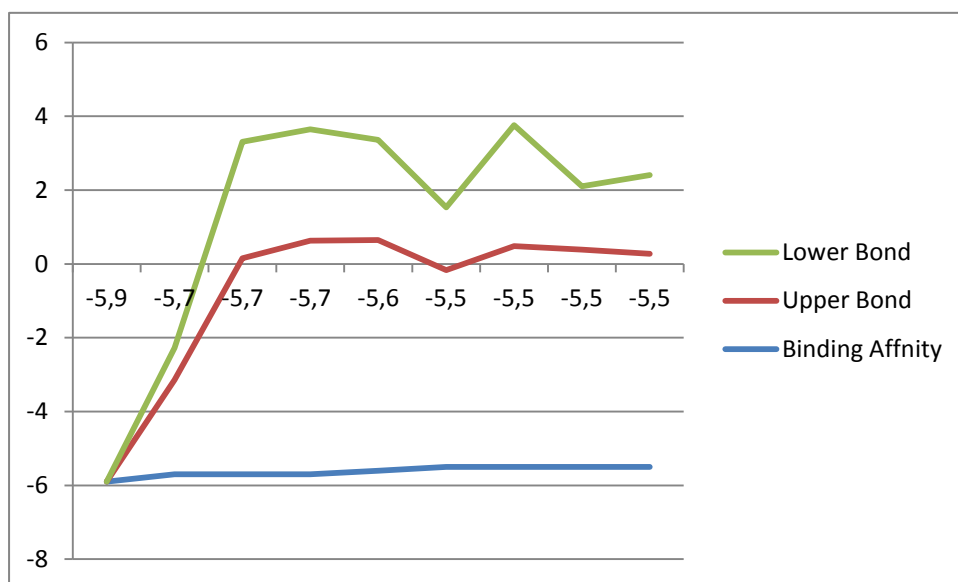
Molecular Docking bertujuan meniru peristiwa interaksi suatu molekul ligan dengan protein yang menjadi targetnya pada uji in-vitro. *Molecular Docking* dilakukan dengan menggunakan software Pyrex untuk mendapatkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. Protease yang digunakan yaitu 7Ike dengan Senyawa Aktif *Alpha Tocopherol*.



Gambar 3. *Molecular Docking* (Courtesy/Nailatul Fadhilah)

Tabel 1. Hasil *Molecular Docking* senyawa aktif *Alpha Tocopherol* dengan Protease 7K0E

<u>Ligand</u>	<u>Binding Affinity (kcal/mol)</u>	<u>Mode</u>	<u>RMSD lower Bound</u>	<u>RMSD Upper Bound</u>
Protein Steril 7K0E uff E=288.57	-5.9	0	0.0	0.0
Protein Steril 7K0E uff E=288.57	-5.7	1	0.868	2.562
Protein Steril 7K0E uff E=288.57	-5.7	2	3.162	5.85
Protein Steril 7K0E uff E=288.57	-5.7	3	3.014	6.334
Protein Steril 7K0E uff E=288.57	-5.6	4	2.719	6.244
Protein Steril 7K0E uff E=288.57	-5.5	5	1.696	5.336
Protein Steril 7K0E uff E=288.57	-5.5	6	3.275	5.986
Protein Steril 7K0E uff E=288.57	-5.5	7	1.715	5.885
Protein Steril 7K0E uff E=288.57	-5.5	8	2.135	5.772



Gambar 4. Grafik RMSD vs *Binding Affinity* (Courtesy/Nailatul Fadhilah)

Gambar 4 menunjukkan hubungan nilai RMSD dengan *Binding Affinity* yang diperoleh dari *Molecular Docking*. Jika nilai RMSD semakin besar akan menyebabkan tarikan antara molekul aktif dan protease 7K0E semakin lemah dan jarak antara kedua molekul tersebut semakin jauh.

4. KESIMPULAN

Riset menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx berhasil mendapatkan nilai *Binding Affinity* dan RMSD. Hasil *Docking* didapat Nilai *Binding Affinity* (kkl/mol) yaitu. -5,9, -5,7, -5,7, -5,7, -5,6, -5,5, -5,5, -5,5, -5,5, untuk RMSD (*Lower Bond*) masing- masing 0,0; 0,868; 3,162; 3,014; 2,719; 1,696; 3,275; 1,715; 2,135 dan RMSD (*Uper Boud*) masing- masing 0,0; 2,562; 5,85; 6,334; 6,244; 5,336; 5,986; 5,885; 5,772.