

ARTICLE

Studi Komputasi PyMol dan PyRx : Pemurnian dan Molecular Docking pada Sars-Cov 19 Varian 6xrz

Syinta Gussri Fatmawati¹, Chici Deta Pratiwi²,

¹Department of Physics, Faculty of Mathematic and Natural Sciences, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

²Department of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Sciences, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia.

email: chicidetaprawi0@gmail.com

ABSTRACT

Penelitian ini bertujuan untuk mengamati dan memurnikan *molecular docking* pada senyawa Beta-Amyrin dengan protease SARSN-CoV-2 varian 6xrz dengan metode yang digunakan adalah aplikasi PyMOL versi 1.7.4.5 dan PyRx versi 0.8 (python.exe) 32 Bit. Penelitian ini menggunakan perangkat ASUS 14-CM0094AU/CM0095AU, OS WIN10 CPU AMD Dual Core E2-7015 1.5 GHz dengan menggunakan situs www.phytochem.nal.usda.gov/. Senyawa beta-amyrin yang merupakan senyawa aktif dari <http://www.pubchem.com/>. Hasil eksperimen ini adalah SMILES C5(C)C(O)C(C)[C@@H]1CC(CC2(C)C)C Protease 6xrz berhasil dimurnikan dengan PyMOL. Hasil docking didapatkan binding affinity (kkal/mol) untuk masing-masing RMSD (*lower bond*) 0,0; 4,568; 1,893; 2,827; 2,746; 1,458; 1,422; 2,741; 1,966 yaitu -7,4; -7,0; -7,0; -7,0; -6,9; -6,9; -6,9; -6,7; -6,5 kkal/mol.

ARTICLE HISTORY

Submission: 4 Mei 2022

Revised: 24 Mei 2022

Accepted: 2 Juni 2022

Published : 4 Juni 2022

Citation: Syinta Gussri Fatmawati, Chici Deta Pratiwi. Astro-Smart Vol 1 nomor 1 hal 1-5

Keywords: 6xrz Variant, PyMOL, PyRx, Sars-Cov-2

1. Pendahuluan

Tawa nan ampek adalah tanaman yang memiliki banyak manfaat bagi Kesehatan manusia. Tawa nan ampek bisa juga menjadi pengobat demam dan flu. Tanaman ini terdiri dari sidingin ,sikarau, sikumpai, dan sitawa sangat terkenal pada daerah tanah datar. Akan tetapi, pemanfaatannya masih belum dimanfaatkan secara optimal.

Kimia komputasi merupakan kunci utama dalam penelitian ini. Kimia komputasi dapat menggambarkan secara visual pada suatu senyawa dan memudahkan dalam menganalisis senyawa tersebut. Kimia komputasi dapat mengatasi kelemahan dan ketidakmampuan dalam teori untuk menjelaskan bentuk dan struktur pada molekul, serta dapat menghemat waktu dan biaya untuk penelitian. Dengan demikian, pada kimia komputasi maka dapat menghemat waktu dan biaya untuk penelitian serta dapat mevisualisasi senyawanya tetapi masih banyak.

Pada riset ini, media yang digunakan pada komputasi adalah PyMol dan PyRx. PyMol merupakan salah satu program visual molekuler open source. Program PyRx merupakan virtual screening tool dimana semua ligan untuk dilakukan docking molecular. Tujuan riset ini berguna untuk menganalisis penggunaan pada PyMol untuk pemurnian dan isolasi protein dan PyRx untuk melihat bounding affinity dari senyawa aktif pada ligan.

BAHAN DAN METODE

Alat dan Bahan

Alat yang digunakan pada riset ini adalah perangkat keras (hardware) laptop dengan spesifikasi ASUS 14-CM0094AU/CM0095AU, OS WIN10 CPU AMD Dual Core E2-7015 1.5 GHz dan RAM 4 GB.

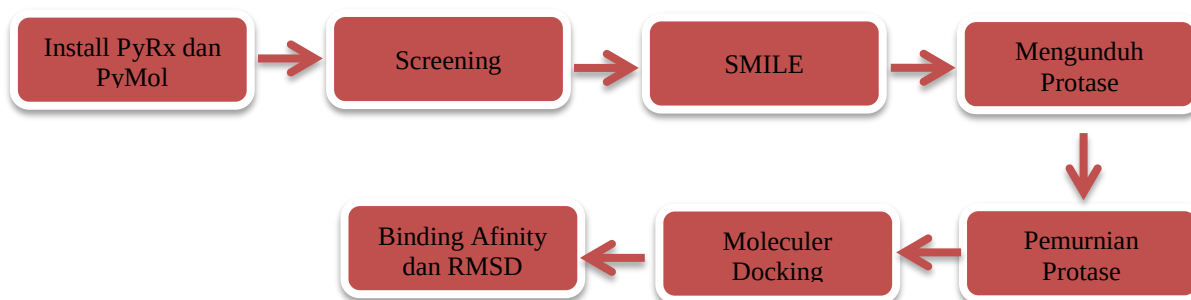
Subjek Penelitian

Protein target yang digunakan SARS-CoV-2 Omicron Variant S Kristal protein ini dapat diunduh dari www.pdb.org dengan kriteria pemilihan kata PDB ID 6xrz klasifikasi Viral Protein Organisme

Organism(s): Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2, Mus musculus pada organisme homo sapiens dengan Electron Microscopy yang berada pada resolusi pengukuran 2,47 Å. Ligan natif yang digunakan adalah protease 6xrz senyawa obat : Beta-amyrin dari tumbuhan Sidingin.

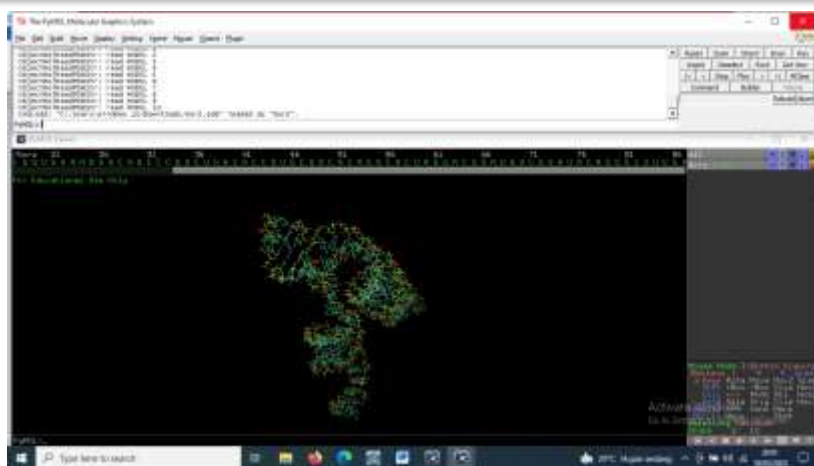
Prosedur Penelitian

Pada riset ini dilakukan diawali dengan menginstal aplikasi PyMol dan PyRx lalu mengambil struktur protein SARS-Cov 2 dari <https://www.rcsb.org>. Struktur yang diambil yang kemudian dimurnikan melalui aplikasi PyMol yang kemudian melakukan proses molecular docking menggunakan aplikasi PyRx.



HASIL DAN PEMBAHASAN

Visual gambar pada protease 6xrz yang diperoleh pada software PyMol maka akan mendapat kan protease yang steril. Sementara itu, untuk mendapatkan data binding affinitynya dan dan RMSD digunakan aplikasi PyRx . Binding affinity dan nilai RMSD dihubungkan untuk menentukan jarak dan tarikan antara molekul aktif dan protease. Hasil pada struktur untuk pemurnian dengan menggunkan PyMol pada strktur protease varian 6xrz. Gambar dibawah menunjukan gambar protease yang telah steril.



Gambar 1. Protease steril

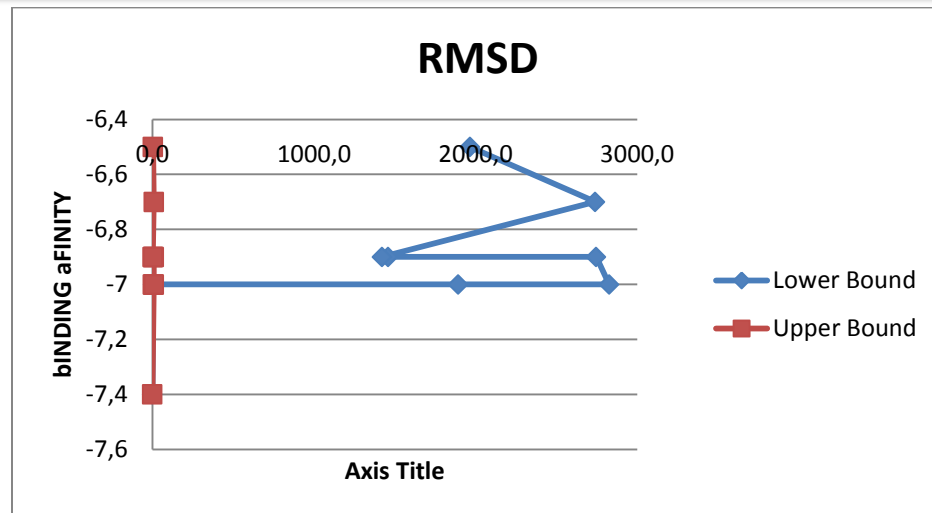
Aplikasi PyRx digunakan untuk melihat molecular docking yang bertujuan untuk meniru peristiwa interaksi suatu molekul ligan dengan targetnya, salah satunya yaitu senyawa aktif. Maka didapatkan binding affinitynya dan nilai RMSD.

Ligand	Binding Affinity (kcal/mol)	Mode	RMSD lower bound	RMSD upper bound
protease steril 6xrz	-7,4	0	0,0	0,0
protease steril 6xrz	-7,0	1	4,658	7,265
protease steril 6xrz	-7,0	2	1,893	3,096
protease steril 6xrz	-7,0	3	2,827	8,334
protease steril 6xrz	-6,9	4	2,746	8,219
protease steril 6xrz	-6,9	5	1,458	3,506
protease steril 6xrz	-6,9	6	1,422	2,739
protease steril 6xrz	-6,7	7	2,741	8,133
protease steril 6xrz	-6,5	8	1,966	3,327

Gambar 2. Binding affinity

Table hasil molecular docking senyawa aktif beta amryn dengan protease 6xrz

Ligan	Binding Afinity (kcal/mol)	Mode	RMSD lower bound	RMSD upper bound
protease steril 6xrz	-7,4	0	0,0	0,0
protease steril 6xrz	-7,0	1	4,658	7,265
protease steril 6xrz	-7,0	2	1.893	3,096
protease steril 6xrz	-7,0	3	2.827	8,334
protease steril 6xrz	-6,9	4	2.746	8,219
protease steril 6xrz	-6,9	5	1.458	3,506
protease steril 6xrz	-6,9	6	1.422	2,739
protease steril 6xrz	-6,7	7	2.741	8,133
protease steril 6xrz	-6,5	8	1.966	3,327



Gambar 3. Hubungan nilai RMSD dengan Binding Affinity

KESIMPULAN

Dari hasil yang didapatkan pada senyawa aktif beta amryn dengan protease steril varian 6xrz didapatkan nilai binding affinity (kkal/mol) untuk masing masing RMSD yaitu -7,4 dan -6,5 kkal/mol, sedangkan untuk nilai RMSD lower bound didapatkan 0,0 dan 1,966.

