

ARTICLE

RMSD dan Binding Affnity *Docking Molecular* Senyawa Aktif Genistein dari Tumbuhan Bunga Telang (*Clitoria ternatea*) dengan Protease SARS-CoV-2 Omicron Varian 7k0e Menggunakan Aplikasi PyMOL dan PyRx

Muhammad Habib¹, Fiqih Sekar Setiowati^{2*}

¹Department of Computer Engineering, Faculty of Science and Technology, Universitas Panca Budi, Medan, Indonesia.

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

* Email: fiqihsekarsetiowati@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini dilakukan untuk menganalisis senyawa aktif Genistein dari tumbuhan Bunga Telang (*Clitoria ternatea*) dengan protease SARS-CoV-2 Omicron Varian 7k0e. Metode yang digunakan yaitu aplikasi EduPyMOL-Versi1.7.4.5-Win32.msi dan PyRx versi PyRx version 0.8 (python.exe) 32 Bit. Sampel dalam penelitian menggunakan senyawa aktif Genistein yang didapatkan pada website <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> dan Screening molekul aktif menggunakan website <http://www.phytochem.nal.usda.gov/>. Protease yang digunakan yaitu protease SARS – Cov – 2 Omicron Varian 7k0e, yang didapatkan pada website RSCB PDB <https://www.rcsb.org/>. Adapun perangkat keras yang digunakan yaitu laptop dengan spesifikasi Acer system model Aspire 5 No. N20C4 processor Intel Core i3 dengan memori 1000 GB RAM 8 GB dan Windows 10 Home. Hasil dari penelitian ini adalah senyawa aktif dengan SMILES C1=CC(=CC=C1C2=COC3=CC(=CC(=C3C2=O)O)O)O. Protease 7k0e berhasil dimurnikan dengan Pymol. Hasil *docking molecular* berhasil didapatkan dengan nilai akhir *Binding Affnity* (kcal/mol) negatif sebesar -7.0. RMSD (*Upper Bown*) 2.723. RMSD (*Lower Bond*) 7.428.

ARTICLE HISTORY

Submission: 10 Mei 2022

Receveid: 29 Mei 2022

Accepted: 4 Juni 2022

Published: 4 Juni 2022

Citation:

Keywords: PyMOL, PyRx, Genistein, dan varian 7k0e

1. Pendahuluan

Bunga telang (*Clitoria ternatea*) merupakan salah satu tanaman leguminosae yang berasal dari Asia Tropis dan sekarang penyebarannya telah sampai Amerika Selatan, Amerika Utara, Brazil Pasifik Utara, dan Afrika. Bunga telang biasanya dimanfaatkan sebagai obat mata, pengencer dahak bagi penderita asma, atau pewarna makanan, namun juga memiliki manfaat farmakologis sebagai antioksidan, antibakteri, antiinflamasi, antiparasit, antidiabetes, dan antikanker. Kandungan bunga telang diantaranya adalah tanin, saponin, fenol, triterpenoid, alkaloid, flobatanin, dan flavonoid. Kandungan flavonoid bunga telang merupakan senyawa metabolit sekunder yang berkhasiat sebagai antioksidan.

Berdasarkan riset ini, *software* PyMOL digunakan untuk menunjukkan tampilan dari struktur yang akan kita teliti. Studi komputasi ini sangat diperlukan untuk menganalisis interaksi molekuler. Aplikasi ini merupakan program visualisasi molekul yang memberikan kualitas gambar 3D yang baik dari molekul yang kita teliti. Pada riset ini dilakukan pemurnian pada Protease SARS-Cov-2 Omicron varian 7k0e.

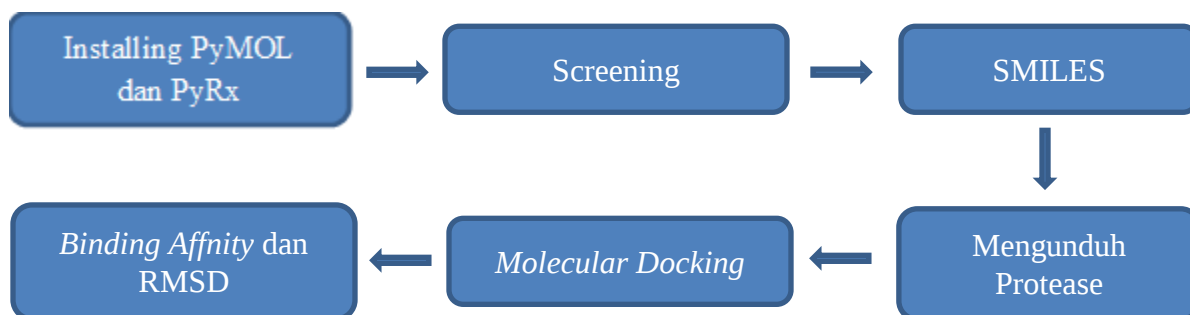
Dalam riset ini dilakukan pemurnian dan molekular docking dengan senyawa aktif menggunakan PyRx, sehingga menghasilkan nilai RMSD *Binding Affnity*. Tujuan riset ini adalah untuk menganalisis interaksi senyawa aktif *Genistein* dari tanaman bunga telang (*Clitoria ternatea*) dengan Protease SARS-Cov-2 varian 7k0e menggunakan *software* PyMOL dan PyRx.

2. Metode

2.1 Persiapan

Sampel dalam penelitian menggunakan senyawa aktif Genistein yang didapatkan pada website <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>. Protease 7k0e protein SARS – Cov – 2 diperoleh dari PDB (<https://www.rcsb.org>). Screening molekul aktif menggunakan website <http://www.phytochem.nal.usda.gov/>. Pemurnia protease 7k0e menggunakan *software* EduPyMOL-Versi1.7.4.5-Win32.msi dan molekular docking dengan *software* PyRx versi PyRx version 0.8 (python.exe) 32 Bit. Perangkat keras Acer system model Aspire 5 No. N20C4, processor Intel Core i3 dengan memori 1000 GB RAM 8 GB dan Windows 10 Home.

2.2 Pelaksanaan



Gambar 1. Skema (Courtesy/ Fiqih Sekar Setiowati)

2.3 Evaluasi

Gambar Protease 7k0e yang telah disterilkan diperoleh dari *software* PyMOL dan data angka Binding Affnity serta RMSD diperoleh dari *software* PyRx. Nilai Binding Affnity dan RMSD dihubungkan untuk menentukan jarak antara molekul aktif dan protease.

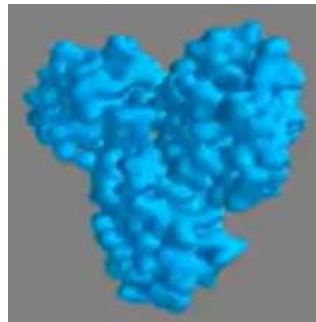
3. Hasil dan Pembahasan

Protease yang belum dimurnikan ditandai dengan adanya bercak – bercak merah berupa air dan native ligand, sehingga dilakukan pemurnian dengan software PyMOL. Lalu protease yang telah dimurnikan diubah menjadi pemodelan 3D dengan struktur *cartoons*, *transparent surfaces*.



Gambar 1. Visualisasi model 3D protein 7k0e

Proses validasi metode molecular docking dilakukan dengan redocking antara native ligand yang telah dipisahkan dari protein target dengan program AutodockTools. Validitas metode ini dinyatakan valid dengan parameter nilai RMSD (root mean square distance).



Gambar 2. Visualisasi Molekular surface protease 7k0e

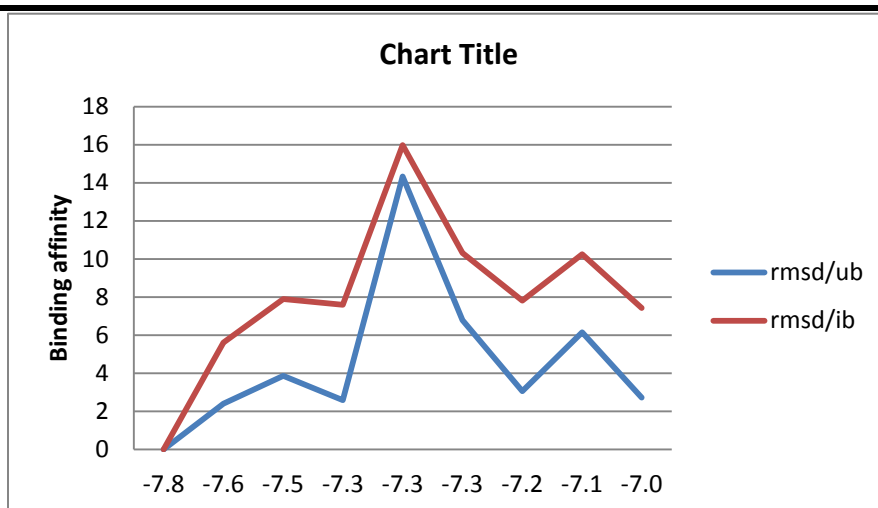
Setelah melakukan makromolekul, ligan dari senyawa aktif yang digunakan dimasukkan ke PyRx untuk diaplikasikan ke makromolekul yang telah dibuat sebelumnya untuk memperoleh nilai *Binding Affnity* dan RMSDnya.



Gambar 3. Visualisasi ligan dari senyawa aktif

Tabel 1. Hasil *Molecular Docking* senyawa aktif Genistein dengan Protease 7k0e

Ligand	Binding Affinity (kcal/mol)	Mode	RMSD lower bound	RMSD upper bound
7k0e_Steril_5282102_uff_E=602,48	-7.8	0	0.0	0.0
7k0e_Steril_5282102_uff_E=602,48	-7.6	1	2.401	5.613
7k0e_Steril_5282102_uff_E=602,48	-7.5	2	3.868	7.901
7k0e_Steril_5282102_uff_E=602,48	-7.3	3	2.592	7.593
7k0e_Steril_5282102_uff_E=602,48	-7.3	4	14.336	15.971
7k0e_Steril_5282102_uff_E=602,48	-7.3	5	6.789	10.321
7k0e_Steril_5282102_uff_E=602,48	-7.2	6	3.063	7.812
7k0e_Steril_5282102_uff_E=602,48	-7.1	7	6.155	10.258
7k0e_Steril_5282102_uff_E=602,48	-7.0	8	2.723	7.428



Gambar 4. Grafik RMSD vs *Binding Affinity* (Courtesy/Fiqih Sekar Setiowati)

4. Kesimpulan

Pada RMSD dan *Binding Affnity* dengan senyawa aktif *Genistein* dengan protease SARS-Cov-2 Varian 7k0e menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx telah berhasil dilakukan ditandai dengan didapatkannya hasil *Binding Affinity* dan RMSD. Adapun nilai akhir *Binding Affinity* yang didapatkan negatif sebesar -7.0 kcal/mol, RMSD (*Upper Bond*) 2.723, dan RMSD (*Lower Bond*) 7.428.