

ARTICLE

Investigasi *Molecular Docking* Senyawa Aktif *Eugenol* dari tanaman *Piper Betle .L* dengan Protease 2r2g menggunakan PYMOL dan PYRX

Nosa Apri Amelia¹, Fadhila Fitria^{2*}

¹Department of Chemistry, 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: fadhilafitria27@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan untuk memurnikan dan kajian *molekuler docking* senyawa aktif *Eugenol* dari tanaman *Piper Betle .L* dengan protease 2R2G. Metode yang digunakan aplikasi Edu PyMOL – Versi 1.7.4.5-Win32 msi dan PyRx versi PyRx version 0.8 (python.exe) 32 Bit. Kajian dilakukan dengan mengobservasi konformasi 3D pada molekul dan ligand yang digunakan. Perangkat yang digunakan adalah prosesor Model 14s-dk1507AU, ~50-06 Hz, RAM 8 GB, Screening molekul aktif menggunakan situs dr. Duke (www.DrDuke.com). senyawa aktif didapatkan dari Pubchem (www.pubchem.com). Perangkat lunak yang digunakan adalah PyRx (Vina dan AutoDock) dan PyMOL. Hasil *docking* didapatkan nilai *Binding afinity* untuk masing-masing RMSD (Lower Bond) 0,0; 5,97; 1,813; 16,462; 13,603; 16,28; 14,107; 15,707; 13,691 dan RMSD (Upper Bond) 0,0; 8,095; 2,875; 17,769; 15,471; 17,399; 15,813; 17,189; 15,594 yaitu - 5,6, -5,3, -5,3, -5,1, -5,0, -4,8, -4,7, -4,7, 4,7.

ARTICLE HISTORY

Submission: 26 April 2022

Recevid: 24 Mei 2022

Accepted: 2 Juni 2022

Published: 4 Juni 2022

Citation: 21 Maret 2022

Keywords: PyMol, Piper Betle L, PyRx, Protease 2r2g.

1. Pendahuluan

Sirih dengan nama latin *Piper Betle .L* adalah tanaman yang banyak dijumpai di Indonesia. Bagian sirih yang umum dimanfaatkan adalah daun sirih. Daun sirih menjadi obat tradisional yang memiliki banyak manfaat. Daun sirih merupakan tanaman penting herbal yang digunakan untuk obat batuk. Herbal merupakan obat alami yang dibuat dari tumbuhan dan hewan. Namun tanaman ini belum banyak digunakan untuk obat.

Banyak daerah- daerah yang memanfaatkan daun sirih sebagai obat. Selain digunakan sebagai obat daun sirih juga digunakan sebagai antiseptik yang dapat menghambat pertumbuhan bakteri. Daun sirih menjadi salah satu tanaman yang banyak mengandung khasiat, sehingga banyak saintis yang melakukan riset mengenai manfaat dari daun sirih.

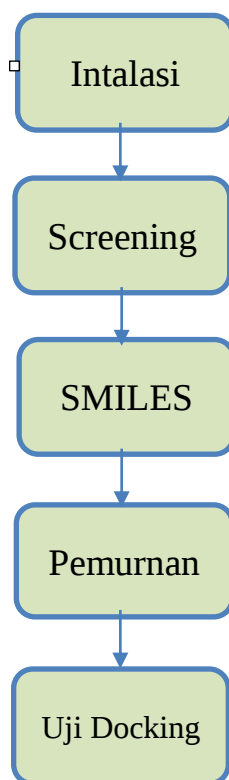
Dalam riset ini dilakukan analisis hubungan protease dengan senyawa aktif menggunakan PyRx dengan metode *Molecular Docking* sehingga didapatkan nilai *Binding Affinity* dan RMSD. Tujuan dari riset adalah untuk investigasi molecular docking senyawa aktif eugenol dari tanaman *Piper Betle* .L dengan protease 2r2g menggunakan PyMOL dan PyRx.

2. Metode

2.1 Persiapan

Senyawa aktif yang digunakan diperoleh dari Dr. Duke (www.phytochem.com). Lalu SMILES diambil dari PubChem (www.pubchem.com). Uji riset dilakukan dengan menggunakan prosesor Model 14s-dk1507AU, ~50-06 Hz, RAM 8 GB dan perangkat lunak PyMOL versi 1.7.4.5. Win32.msi dan PyRx versi 0.8 32 Bit.

2.2 Pelaksanaan



Gambar 1. Skema (Courtesy/Fadhila Fitria)

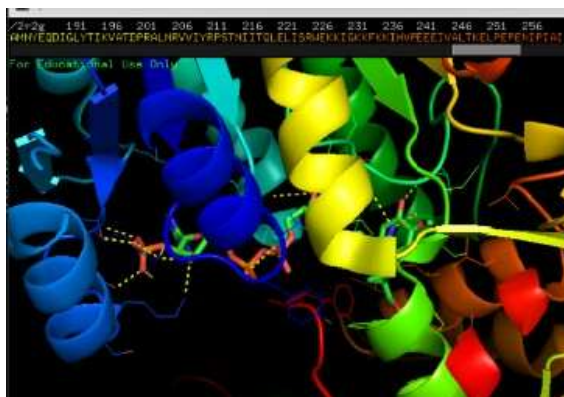
Pelaksanaan riset dimulai dengan Instalasi dilakukan instal aplikasi PyMOL dan PyRx, kemudian screening molekul aktif menggunakan situs Dr. Duke. Setelah itu dilakukan pencarian smiles senyawa aktif menggunakan situs Pubchem. Dilanjutkan dengan pemurnian molekul dengan aplikasi PyMOL dan setelah dimurnikan dilakukan molecular docking dengan aplikasi PyRx sehingga diperoleh binding affinity dan RMSD.

2.3 Evaluasi

Sterilisasi protein dapat dilakukan dengan aplikasi PyMOL dan data Binding Affinity dan RMSD diperoleh dari PyRx. Binding Affinity dihubungkan untuk menentukan jarak antara molekul aktif dan protease

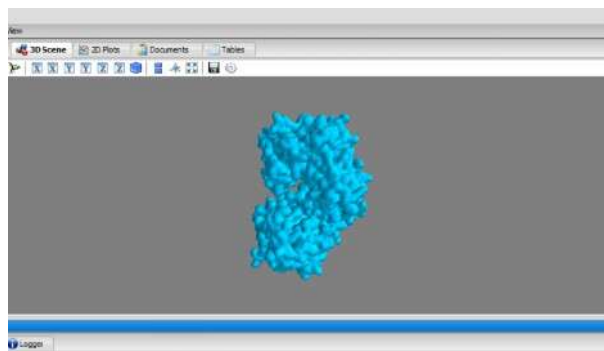
3. Hasil

Visualisasi dengan struktur 3D dilakukan melalui aplikasi PyMOL versi 1.7.4.5. Win32.msi. Sterilisasi protease dilakukan dengan menghilangkan pengotor dan ligan yang terdapat pada protease 2r2g.



Gambar 2. Visualisasi model 3D protein 2r2g (Courtesy/Fadhila Fitria)

Setelah protease disterilkan pada aplikasi PyMOL dilanjutkan dengan menggunakan aplikasi PyRx versi 0.8 32 Bit dengan cara pengaplikasian protease 2r2g yang telah steril dengan ligan dari senyawa aktif yang digunakan.



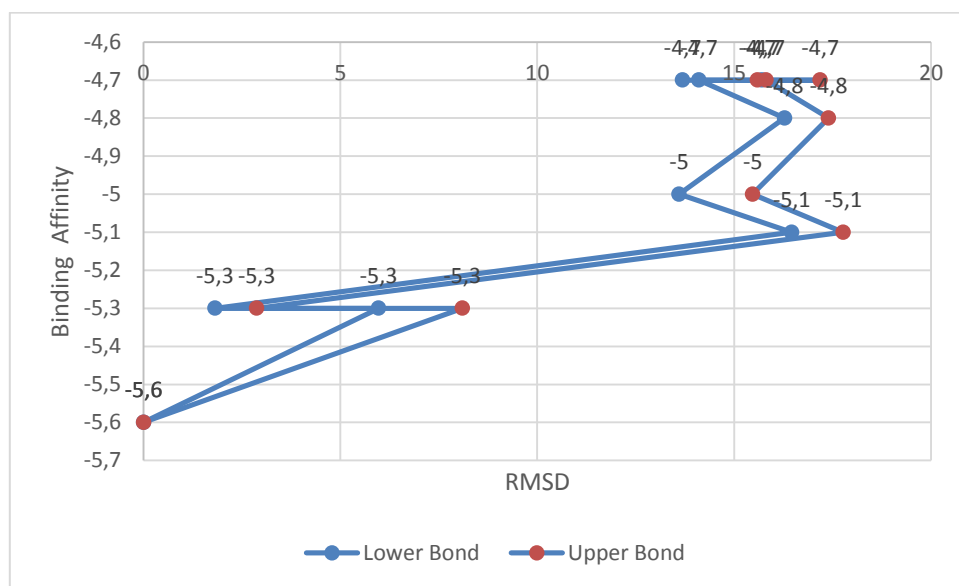
Gambar 3. Molecular Surface protein 2r2g (Courtesy/Fadhila Fitria)

Table 1. Binding Afinity dan RMSD

Ligan	Binding Afinity (kcal/mol)	Mode	RMSD lower Bound	RMSD Upper Bound
2r2g_steril_3314_uff_E=169.56	-5.6	0	0.0	0.0

2r2g_steril_3314_uff_E=169.56	-5.3	1	5.97	8.095
2r2g_steril_3314_uff_E=169.56	-5.3	2	1.813	2.875
2r2g_steril_3314_uff_E=169.56	-5.1	3	16.462	17.769
2r2g_steril_3314_uff_E=169.56	-5.0	4	13.603	15.471
2r2g_steril_3314_uff_E=169.56	-4.8	5	16.28	17.399
2r2g_steril_3314_uff_E=169.56	-4.7	6	14.107	15.813
2r2g_steril_3314_uff_E=169.56	-4.7	7	15.707	17.189
2r2g_steril_3314_uff_E=169.56	-4.7	8	13.691	15.594

Dari protein 2r2g yang disterilkan dengan PyMOL kemudian direaksikan dengan ligan dari senyawa aktif yang digunakan dengan menggunakan aplikasi PyRx untuk memperoleh Binding Affinity dan RMSDnya.



Gambar 4. Grafik RMSD dan *Binding Affinity*(Courtesy/Fadhila Fitria)

4. Kesimpulan

Riset menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx berhasil mendapatkan nilai *Binding Affinity* dan RMSD. Hasil *Docking* didapat Nilai *Binding Affinity* (kkl/mol) untuk masing- masing RMSD yaitu -5.6, -5.3, -5.3, -5.1, -5.0, -4.8, -4.7, -4.7, 4.7. Sementara RMSD(*upper Bond*) masing- masing 0,0; 8,095; 2,875; 17,769; 15,471; 17,399; 15,813; 17,189; 15,594 dan RMSD (*Lower Bond*) masing- masing 0,0; 5,97; 1,813; 16,462; 13,603; 16,28; 14,107; 15,707; 13,691.