

ARTICLE

PyMOL dan PyRx: Purifikasi dan *Docking Molecular 2-Methyl-2-Phytyl-6-Crhomanol* dari *Aloe Vera* dengan Protease SARS-CoV-2 varian 7djr

Machmudah¹, Yoni Afrilia^{2*}

¹Department of Physics, Faculty of Methematic and Natural Science, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

²Department of Chemistry, Faculty of Methematic and Natural Science, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

email: afriyayoni29@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) dan senyawa aktifnya didapatkan dari pubchem (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)C)O. Protease 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: 2 Juni 2022

Pnblish : 4 Juni 2022

Citation:

Keywords:

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.

PyMOL dan PyRx: Purifikasi dan *Docking Molecular 2-Methyl-2-Phytyl-6-Crhomanol* dari *Aloe Vera* dengan Protease SARS-CoV-2 varian 7djr

2

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.

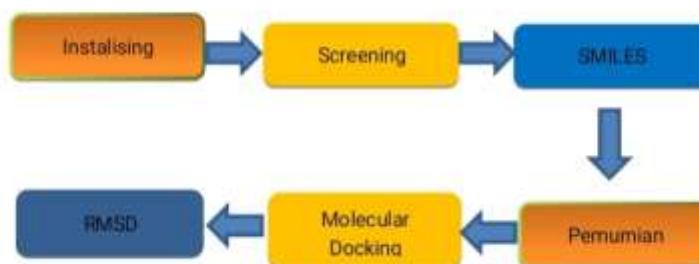
Namun, belum begitu banyak dijumpai riset mengenai tanaman ini. Oleh karena itu, riset ini bertujuan untuk menganalisis hubungan protease Sars-CoV-2 varian 7djr dengan senyawa aktif *2-Methyl-2-Phytyl-6-Crhomanol* menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx dengan metode *molecular docking* sehingga didapatkan nilai *Binding Affinity* dan RMSD.

2. MetodeCC

2.1 Persiapan

Senyawa aktif diambil dari situs Dr.Duke (www.phytochem.com). SMILES molekul diperoleh dari pubchem (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.

2.2 Pelaksanaan



Gambar 1. Skema(Courtesy/Yoni Afrilia)

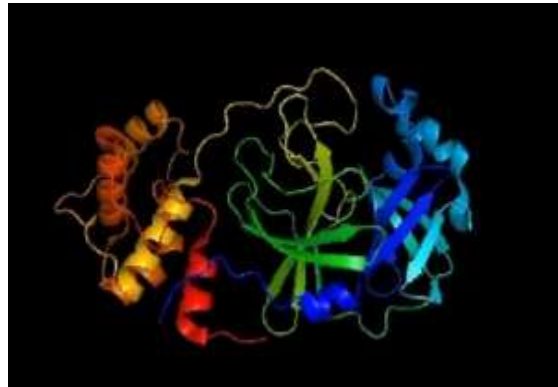
Pelaksanaan riset dimulai dengan instalasi dilakukan instal aplikasi PyMOL dan PyRx. Kemudian screening molekul aktif menggunakan situs Dr.Duke. Setelah itu dilakukan pencarian SMILES senyawa aktif menggunakan situs pubchem. Dilanjutkan dengan pemurnian molekul dengan aplikasi PyMOL dan setelah dimurnikan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

2.3 Evaluasi

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

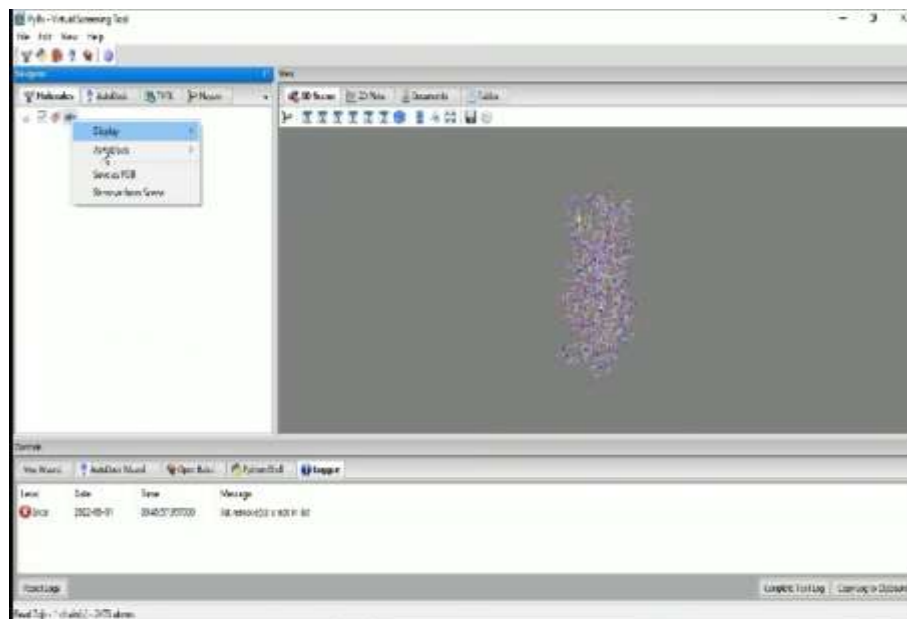
3. Hasil dan Pembahasan

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 ligandengan 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)

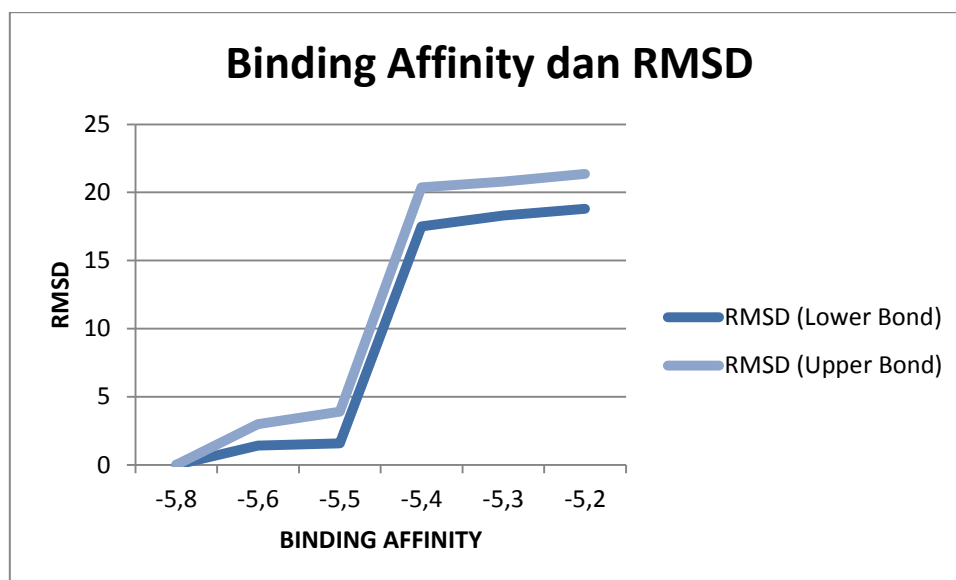
PyMOL dan PyRx: Purifikasi dan *Docking Molecular 2-Methyl-2-Phytyl-6-Crhomanol* dari *Aloe Vera* dengan Protease SARS-CoV-2 varian 7djr

4

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

ligand	Binding Affinity (kkal/mol)	RMSD (Lower Bond)	RMSD (Upper 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, 316	20.797
7djr_9865117_uff_E=250.52	-5,2	18, 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.