

ARTIKEL

Studi Komputasi Protein Spike Virus Sars-Corv-2 Varian 6VYB pada Aspek Pemurnian dan Isolasi Selektif dengan PyMol

Muhammad Afif^a, Yusma Hartini^b, Farras Aulia Sugria^c

^aPendidikan Teknik Bangunan, Fakultas Teknik, Universitas Negeri Malang, Malang, Indonesia

^bIlmu Kelautan, Fakultas Ilmu Kelautan dan Perikanan Universitas Maritim Raja Ali Haji, Tanjung Pinang, Indonesia

^c Pendidikan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

email: farrasauliasugria@gmail.com

ABSTRAK

Studi riset ini bertujuan untuk menganalisis studi komputasi protein spike virus Sars-Corv-2 varian 6VYB pada aspek pemurnian dan isolasi selektif dengan menggunakan PyMol. Dalam hal ini metode yang digunakan yaitu pemodelan molekuler dengan menggunakan aplikasi PyMol versi 2.5.2 dikeluarkan oleh Schödinger, LLC. Riset ini menggunakan terdapat aspek yaitu pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang digunakan terhadap salah satu varian protein spike virus yaitu Sars-Corv-2, yang disiapkan dari situs <https://www.rcsb.org/>. Analisis komputasi dengan menggunakan perangkat keras komputer dengan spesifikasi *processor* AMD Pro A10-8700B R6, 10 Computer Cores 4C + 1.80 dengan RAM 8.00 GB. Varian yang dimurnikan dan diisolasi yaitu 6VYB, Sehingga menghasilkan protein murni protein spike virus Sars-Corv-2 varian 6VYB. Diperoleh varian 6VYB dihasilkan dalam bentuk *remove water* dan *ligand sites*. Pemurnian dan isolasi varian 6VYB berhasil memisahkan air dan pengotor lain pada protein target.

ARTICLE HISTORY

Submission: 04 April 2022

Receveid: 21 Mei 2022

Accepted: 02 Juni 2022

Published: 05 Juni 2022

Citation:

Muhammad Afif, Yusma Hartini, dan Farras Aulia Sugria. (2022). Jurnal Iklim Kelas. Volume 1 No. 1 Halaman 1-4.

Keywords: Spike Sars-Corv-2; Varian 6VYB; PyMOL

1. Pendahuluan

Studi komputasi merupakan sebuah solusi yang tepat untuk memecahkan berbagai permasalahan dalam kimia. Manfaat mempelajari studi komputasi yaitu dapat memvisualisasikan molekul senyawa seperti protein. Dalam studi komputasi protein Sars-Corv-2 adalah salah satu spike protein yang dapat diteliti dengan metode pemodelan molekuler. Namun hingga saat ini belum banyak yang meneliti protein Sars-Corv-2 dengan menggunakan *software* PyMOL pada metode pemodelan molekuler.

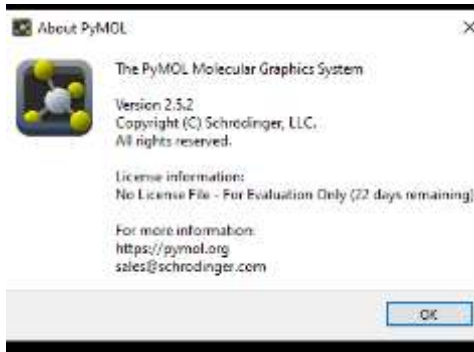
PyMOL merupakan salah satu program visualisasi yang dapat memahami struktur molekul kimia yaitu. Selain itu PyMOL dapat menampilkan gambar dengan tiga dimensi berkualitas baik

dan mampu menyajikan tampilan struktur dalam beberapa warna baik secara mikromolekul maupun makromolekul. Visualisasi sangat penting agar lebih mendalami dan memahami struktur molekul. Perangkat lunak ini dirilis oleh DeLanion Scientific LLC [1].

Dalam riset ini, analisis struktur dilakukan menggunakan *software* PyMol. Dari berbagai varian virus Sars-Corv-2, maka dipilih varian 6VYB. Riset ini bertujuan untuk studi komputasi protein spike virus Sars-Corv-2 varian 6VYB pada aspek pemurnian dan isolasi selektif.

2. Metode

Pada bagian ini digunakan *software* PyMOL versi 2.5.2 dikeluarkan oleh Schödinger, LLC (Gambar 1). Dengan perangkat yang memiliki spesifikasi *processor* AMD Pro A10-8700B R6, 10 Computer Cores 4C + 1.80 dengan RAM 8.00 GB. Sedangkan struktur spike protein dapat dicari melalui situs <https://www.rcsb.org/> (Gambar 2).

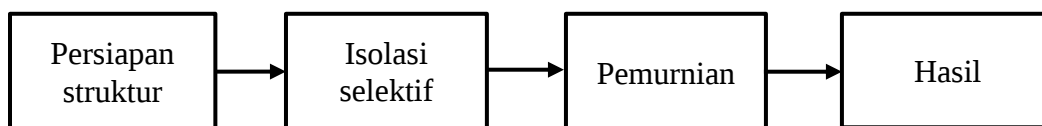


Gambar 1 *software* PyMOL



Gambar 2 Situs spike protein

Pada tahap pelaksanaan perlu dilaksanakan secara sistematis (Gambar 3).

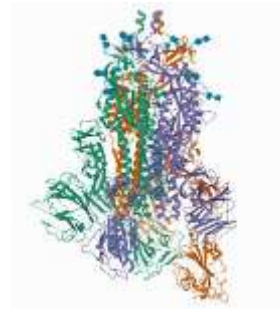


Gambar 3 Skema pekerjaan

Persiapan struktur dilakukan dengan memilih struktur yang akan diisolasi. Buka situs <https://www.rcsb.org/>. Pilih spike protein yang diinginkan. Dalam hal ini pilih protein spike virus Sars-Corv-2 dengan Varian 6VYB. Selanjutnya yaitu isolasi selektif dengan menggunakan PyMOL pilih *tools remove waters*. Pemurnian dilakukan dengan cara menghapus ligan-ligan yang terputus pada spike protein Varian 6VYB dalam Gambar 4 (a dan b) berikut.



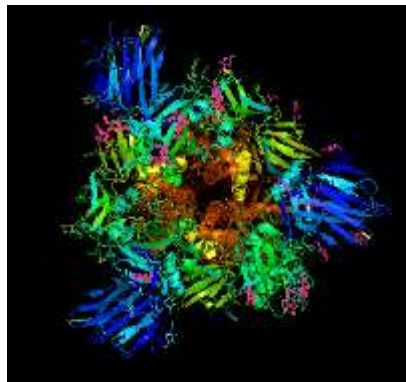
a. Ligan yang harus dihapus varian 6VYVB



b. Protein virus Sars-Cov-2

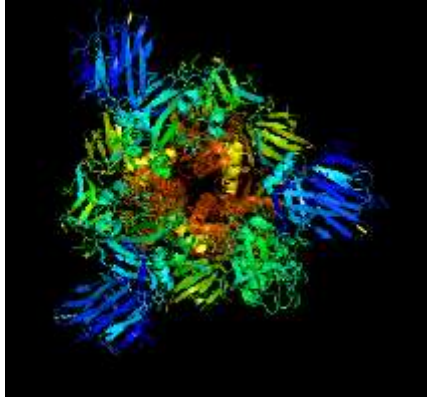
3. Hasil dan Pembahasan

Spike protein dengan varian 6VYB didapatkan melalui situs <https://www.rcsb.org/>. Varian 6VYB yang baru didapatkan melalui *website* tersebut merupakan spike protein yang masih mengandung air dan warna yang dihasilkan belum sempurna sehingga hal ini menandakan bahwa spike protein belum murni (Gambar 5).



Gambar 5 Protein yang belum murni

Diperlukan Isolasi selektif dengan melakukan pemisahan air dan pengotor lainnya pada protein. Pemisahan air dan pengotor ini menggunakan PyMol dengan mengklik “All” atau “A”. Lalu pilih “Remove Waters”. Setelah itu, Klik “All” atau “A”, lalu pilih “Preset”, pilih “Ligand sites”, kemudian pilih “Cartoon”. Kemudian dapat menghapus bagian yang terputus atau pengotor untuk memperoleh spike protein murni (Gambar 6). Sehingga aspek permodelan diperoleh hasil dari studi protein spike virus Sars-Cov-2 varian 6VYB dengan menggunakan *software* PyMol.



Gambar 6 Protein yang sudah murni

4. Kesimpulan

Pada riset ini dapat disimpulkan bahwa, spike protein varian 6VYB telah berhasil dimurnikan dari air, ligan dan pengotor lain melalui berbagai tahapan pada aspek pemurnian dan isolasi selektif dengan menggunakan *software* PyMol versi 2.5.2. Sehingga riset ini dapat dilanjutkan secara dinamis pada tahapan interaksi molekuler.

Ucapan Terimakasih

Penulis mengucapkan terimakasih kepada jurusan Kimia prodi Pendidikan Kimia Universitas Negeri Padang yang telah mendukung penulisan artikel ini.

Referensi

[1]DeLano, W. L., & Bromberg, S. (2004). PyMOL User's Guide. San Carlos, California, U.S.A: DeLano Scientific LLC