

ARTICLE

Studi Molekular Software Pymol untuk Purifikasi dan Isolasi Selektif pada Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7CWM

Hanifa Shafira¹ Nadya Gustiranda Cahyeni² Fadhila Rahmi³

1 Fisika, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

2 Teknik Elektro, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta, Indonesia

3 Pendidikan Kimia, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

Email : Fadhilarahmi27@gmail.com

ABSTRACT

Tujuan riset ini yaitu untuk menganalisis studi molekular software untuk purifikasi dan isolasi selektif pada protein spike virus sars-cov-2 varian 7CWM. Metode yang digunakan adalah pemodelan molekular dengan software pymol versi 2.5.2 dikeluarkan oleh Schrodinger. Aspek kajian dalam riset ini adalah purifikasi dan isolasi selektif. Protein yang dipakai adalah varian spike virus sars-cov-2, yang disiapkan dari pubchep (website RSCB). Analisis komputasi menggunakan perangkat komputer dengan spesifikasi Cores 4C + 1.80 dengan RAM 8.00 GB . Hasil dari riset ini diperoleh varian yang diisolasi dan dimurnikan adalah spike sars-cov-2 varian 7CWM. Diperoleh protein varian 7CWM yang berbentuk visualisasi remove water dan visualisasi ligan. Pemurnian dan isolasi varian berhasil memisahkan air dan pengotor lain pada protein target.

ARTICLE HISTORY

Submission: 3 Juni 2022

Revised: 30 Mei 2022

Accepted: 4 April 2022

Published: 5 Juni 2022

Citation:

Keywords: Spike Sars-Cov-2, Varian 7CWM, Pymol

1. Pendahuluan

Kimia komputasi memegang peranan sangat penting dalam penelitian pemurnian protein. Mempelajari kimia komputasi bertujuan untuk membantu menyelesaikan permasalahan kimia. Salah satu simulasi komputer kimia komputasi adalah pemodelan molekul menggunakan software pada komputer. Pemodelan molekul merupakan alat utama untuk menghitung energi yang diberikan oleh suatu struktur molekul. Namun, Implementasi molekul dari pemodelan belum optimal, maka dari itu dilakukan investigasi pemodelan molekular menggunakan *software PyMol*.

Berdasarkan hasil riset studi pemodelan sudah banyak digunakan diantaranya pymol. Pymol merupakan program visualisasi yang difungsikan untuk memahami struktur serta dapat menampilkan gambar tiga dimensi yang

baik dan mampu menyajikan tampilan struktur dalam beberapa warna pada suatu molekul baik itu molekul kecil maupun makromolekul, salah satu contohnya protein. PyMOL dapat menghasilkan gambar 3D berkualitas tinggi dari molekul kecil dan makromolekul biologis, seperti protein.

Dalam riset ini dikaji studi molekular software pymol untuk purifikasi dan isolasi selektif pada protein spike virus cars-cov-2 varian 7CWM penggunaan pymol untuk tujuan purifikasi dan isolasi selektif. Kajian itu diterapkan pada salah satu varian virus sars-cov-2 yang saat ini menjadi isu dunia. Riset ini bertujuan untuk studi molekular software pymol untuk purifikasi dan isolasi selektif pada protein spike virus cars-cov-2 varian 7CWM.

2. Metode

Peralatan yang digunakan untuk melakukan percobaan purifikasi dan isolasi selektif protein adalah aplikasi PyMol versi 2.5.2 dan juga website <https://www.rcsb.org/> untuk mendownload spike protein. Perangkat yang digunakan memiliki spesifikasi processor AMD Pro A10-8700B R6, 10 Compute Cores 4C + 1.80 dengan RAM 8.00 GB. Sedangkan struktur spike protein dapat dicari melalui situs <https://www.rcsb.org/> (Gambar 2).

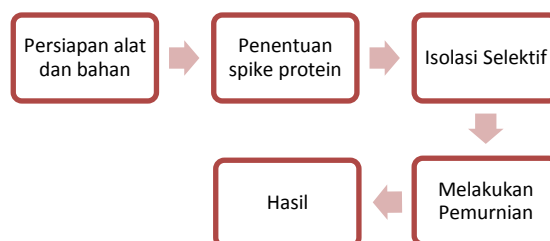


Gambar1 softwarePyMOL



Gambar2 Situs spike protein

Riset ini dilakukan dengan tahap-tahapan secara sistematis sebagaimana terlihat pada skema pada gambar 3.



Gambar 3. Diagram kajian riset

Tahap pertama adalah penyiapan struktur. Pada tahap ini struktur protein spike virus Sars-Cov-2 diperoleh dengan menjelajahi situs <https://www.rcsb.org/>. setelah memasuki situs rcsb tersebut, ketik “Sars Cov” pada kolom pencarian dan pilih protein spike virus Sars-Cov-2. Pada riset ini, protein spike virus Sars-Cov-2 yang akan dimurnikan dan diisolasi sebagian adalah protein spike virus Sars-Cov-2 varian 7CWM. Spike protein diunduh dengan cara memilih nama varian dan klik “download files”, lalu unduh spike protein tersebut dalam format CIF.

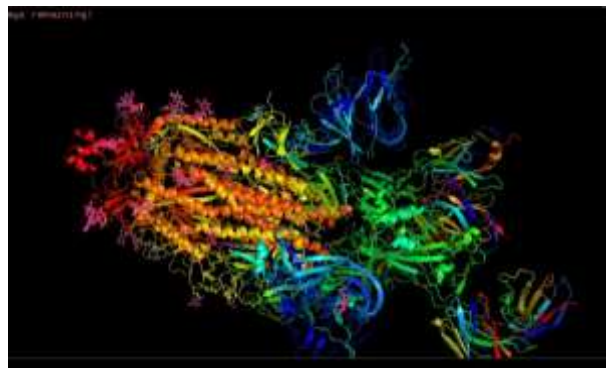
Setelah spike protein telah berhasil diunduh, maka spike protein sudah dapat digunakan dalam proses pemurnian dan isolasi sebagian melalui penerapan *software* PyMol.

Tahap kedua adalah isolasi selektif. Pada tahap ini melalui penerapan *software* PyMol dilakukan proses isolasi. Spike protein yang telah diunduh, diisolasi pada *software* PyMol dengan cara klik *tool* “*remove water*”

Tahap ketiga adalah pemurnian. Pada tahap ini spike protein yang telah diisolasi dilakukan pemurnian. Tahap pemurnian dilakukan dengan cara menghapus *ligand sites* dan menerapkan struktur dalam tampilan *cartoon*.

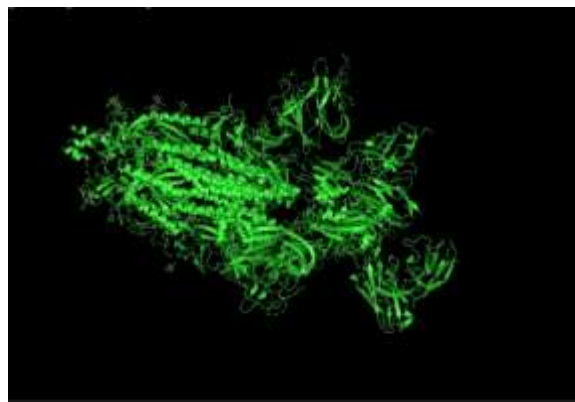
3. Hasil dan Pembahasan

Spike protein dengan varian 7CWM didapatkan melalui website <https://www.rcsb.org/>. Terbukti bahwa spike protein ini masih mengandung air dan warna yang dihasilkan belum sempurna sehingga hal ini menandakan bahwa *spike* protein belum murni (Gambar 4).



Gambar 4 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 7). Sehingga aspek permodelan diperoleh hasil dari studi molekular *software* pymol untuk purifikasi dan isolasi selektif pada protein spike virus cars-cov-2 varian 7CWM.



Gambar 5 Protein yang sudah murni

4. Kesimpulan

Setelah melalui berbagai tahapan meliputi tahap persiapan struktur, isolasi selektif, dan pemurnian yang dilakukan dengan melakukan studi molekular software pymol untuk purifikasi dan isolasi selektif pada protein spike virus cars-cov-2 varian 7CWM. Sehingga *spike*protein ini telah berhasil dimurnikan tanpa terdapat air dan pengotor lain.