

ARTIKEL

Pemodelan Molekuler Struktur 3D *In Silico* Protein Spike Virus SARS-CoV-2 Varian 7VND Menggunakan Aplikasi PyMOL

Rhewina Rushe^a, Bayyid Gholbi Kalyakuti^b, Aprilia Wilda Nengsih^c

^aGizi, Fakultas Gizi, Politeknik Kesehatan Kementerian Kesehatan Padang, Padang, Indonesia

^bManajemen Bisnis, Fakultas Ekonomi, Universitas Wijaya Putra, Surabaya, Indonesia

^cPendidikan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA), Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

email: apriawilda44@gmail.com

ABSTRAK

Riset ini bertujuan untuk pemurnian dan isolasi selektif dari protein spike virus SARS-CoV-2 varian 7VND menggunakan aplikasi PyMOL. PyMOL adalah sebuah alat rumit yang dirancang untuk para profesional ilmiah yang ingin mengetahui struktur molekul berbagai zat. Metode yang digunakan dalam penelitian ini yaitu pemodelan molekuler. Pemodelan molekuler menggunakan aplikasi PyMOL versi 1.7.4.5-Win32.msi dengan menggunakan perangkat Acer Aspire Switch 10 SW5-012-1432 Hibrida/10.1"/2 GB DDR3L-SD/RAM 64 GB SSD/Windows 10 Pro 32-bit. Dalam melakukan penelitian ini terdapat beberapa tahapan. Pertama, dilakukan pemilihan spike protein yang akan digunakan pada situs <https://www.rcsb.org/>. Tahap selanjutnya, dilakukan pemurnian dan isolasi selektif dengan menggunakan aplikasi PyMOL. Studi komputasi adalah kajian yang digunakan untuk menggambarkan visualisasi menggunakan komputer. Hasil yang didapatkan yaitu visualisasi varian protein yang belum dimurnikan, protein yang telah di-remove waters dan ligand sites, dan protein yang telah diisolasi spike varian 7VND virus SARS-CoV-2.

ARTICLE HISTORY

Submission: 04 April 2022

Received: 21 Mei 2022

Accepted: 02 Juni 2022

Published : 06 Juni 2022

Citation:

Rhewina Rushe, Bayyid Gholbi Kalyakuti, dan Aprilia Wilda Nengsih. (2022). Jurnal Iklim Kelas. Volume 1 No. 1 Halaman 1-4

Keywords: SARS-CoV-2; Spike Protein; varian 7VND; PyMOL

1. Pendahuluan

Pemodelan molekul adalah kajian utama dalam riset pemurnian dan isolasi protein. Pemodelan molekul adalah kajian yang digunakan untuk menggambarkan visualisasi menggunakan komputer. Dengan pemodelan molekul ini, kimiawan dapat terbantu dalam berbagai hal seperti menentukan sifat dari molekul, struktur dan perhitungan kimia komputasi dalam berbagai parameter struktur antara lain : panjang gelombang, sudut ikatan, sudut dihedral. Hasil perhitungan inilah yang ditampilkan dalam bentuk visualisasi gambar tiga dimensi yang nantinya akan ditampilkan melalui penggunaan berbagai aplikasi komputasi kimia. Pemodelan molekuler ini sangat membantu peneliti dalam memvisualisasikan molekul

yang akan diteliti. Namun, implementasi dari pemodelan molekuler ini dalam perhitungan panjang gelombang, sudut gelombang, sudut ikatan dan sudut dihedral kurang teraplikasikan dengan baik.

Berdasarkan hasil riset yang pernah dilakukan, studi komputasi dalam penggunaan aplikasi sudah banyak digunakan. Salah satu aplikasi yang digunakan ini adalah aplikasi PyMOL. PyMOL merupakan suatu program yang digunakan untuk memeriksa molekul tiga dimensi atau dengan kata lain menggambarkan struktur kimia secara tiga dimensi. Selain itu, PyMOL juga mampu menyajikan tampilan struktur dalam beberapa warna dari suatu molekul kecil maupun makromolekul termasuk struktur protein, asam nukleat (RNA, DNA, tRNA), molekul kecil penuntun obat, inhibitor, metabolit dan ligan lain seperti garam anorganik [1].

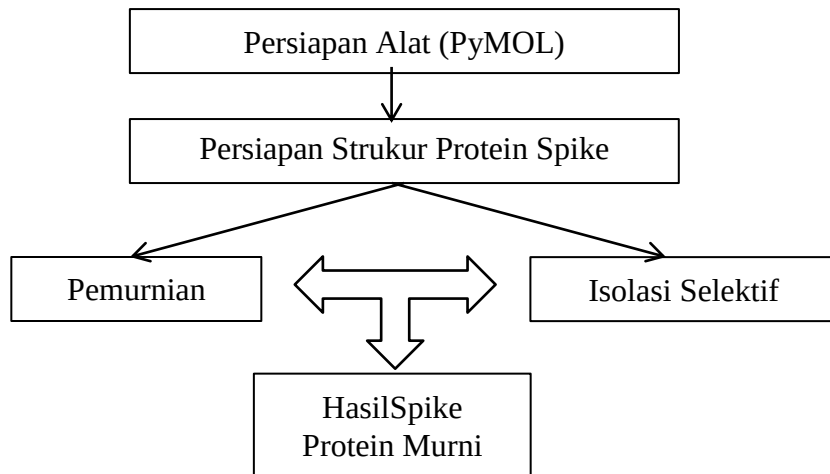
Dalam riset ini, dikaji penggunaan PyMOL untuk melihat spike protein murni. Kajian itu diterapkan pada salah satu varian SARS-CoV-2 yang saat ini sedang menjadi trending topik di dunia. Riset ini bertujuan untuk pemurnian dan isolasi selektif dari protein spike virus SARS-CoV-2 varian 7VND menggunakan aplikasi PyMOL tersebut.

2. Metode

Penelitian ini dilakukan pada protein spike virus SARS-CoV-2 varian 7VND dengan menggunakan aplikasi PyMOL versi 1.7.4.5-Win32.msi dari *Schodinger* yang telah didownload pada laptop yang digunakan. Dimana perangkat keras (*Hardware*) yang digunakan yaitu perangkat Acer Aspire Switch 10 SW5-012-1432 Hibrida/10.1"/2 GB DDR3L-SD/RAM 64 GB SSD/Windows 10 Pro 32-bit.

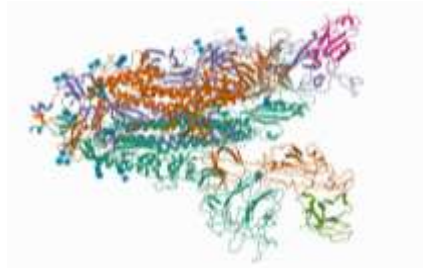
Pada riset ini, pemilihan spike protein virus SARS-CoV-2 yang akan digunakan didownload terlebih dahulu dari situs <https://www.rcsb.org/> dalam bentuk format “cif”. Struktur yang telah didownload kemudian dilakukan pemurnian dan isolasi menggunakan aplikasi PyMOL. Kemudian struktur dimurnikan dengan menghilangkan air, natif ligan, dan pengotor lain yang telah menempel pada protein yang dimurnikan.

Tahap pemurnian pada aplikasi PyMOL dapat dilihat seperti diagram alir di bawah ini :



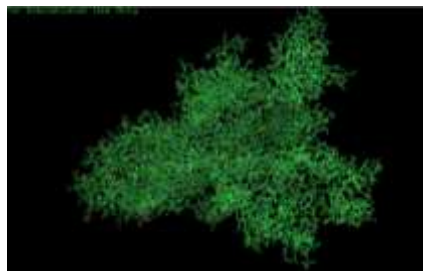
Pada riset yang dilakukan, struktur virus SARS-CoV-2 diperoleh dari situs <https://www.rcsb.org/>. Pada kolom pencarian dalam situs ketik “SARS CoV” dan pilih protein spike virus yang ingin di

murnikan. Pada penelitian ini protein spike virus yang dipilih yaitu spike virus SARS-CoV-2 varian 7VND. Kemudian spike virus tersebut download dalam bentuk “cif”.



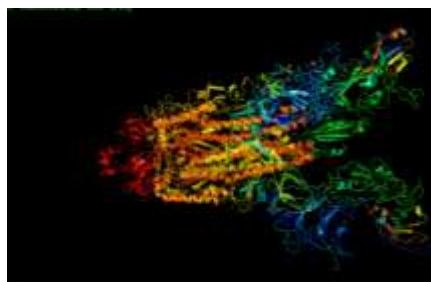
Gambar 1. Protein Spike Virus SARS-CoV-2 Varian 7VND pada situs

Tahap selanjutnya, protein spike yang telah didownload dimurnikan dengan aplikasi PyMOL. Caranya dengan membuka aplikasi PyMOL, kemudian klik File → Open → pilih file yang akan dimurnikan dan diisolasi. Selanjutnya, arahkan kursor pada menu yang ada di aplikasi PyMOL yang disimbolkan dengan huruf “S” (Sele) pada kanan bawah aplikasi.



Gambar 2. Protein Virus SARS-CoV-2 Varian 7VND

Tahap selanjutnya yaitu pelaksanaan, untuk pemurnian protein dari air yang dilakukan dengan cara, klik “A” (all) pada spike yang sudah di masukkan dan pilih “Remove Waters”. Kemudian dilakukan pemurnian protein dari natif ligan dengan cara klik “A” (all) lagi, lalu pilih preset, kemudian pilih ligan sites dan pilih cartoon. Selanjutnya, geser ke ujung kanan, lalu hapus bagian yang terputus/terpisah dengan cara select semua bagiannya lalu klik kanan dan klik “remove”. Maka setelah itu protein telah berhasil dimurnikan dan diisolasi.



Gambar 3. Hasil Pemurnian Protein Virus SARS-CoV-2 Varian 7VND

3. Hasil dan Pembahasan

Pemurnian dan isolasi protein spike virus SARS-CoV-2 varian 7VND dilakukan dengan menggunakan aplikasi PyMOL. Dimana aplikasi PyMOL dapat memvisualisasikan suatu molekul dalam

tiga dimensi. Pemurnian dilakukan dengan menghilangkan air, natif ligan dan pengotor lainnya pada struktur awal protein. Struktur awal dapat dilihat pada (Gambar 2), dimana struktur berwarna hijau dan terdapat molekul air yang ditandai dengan titik-titik warna merah.

Selanjutnya dilakukan pemurnian dengan menghilangkan struktur molekul air, natif ligan, dan beberapa pengotor lainnya dengan beberapa tahap yang dijelaskan pada bagian evaluasi. Hasil dari pemurnian dan isolasi protein spike virus SARS-CoV-2 varian 7VND dapat dilihat pada (Gambar 3).

4. Kesimpulan

Penelitian pemurnian dan isolasi protein spike virus SARS-CoV-2 varian 7VND berhasil dilakukan dengan menggunakan aplikasi PyMOL versi 1.7.4.5-Win32.msi. Hal ini ditandai dengan (Gambar 3), dimana titik-titik merah yang merupakan molekul air hilang, dan natif ligan serta beberapa pengotor lain yang juga hilang. Ini menandakan bahwa spike protein yang diteliti sudah dalam keadaan murni.

Ucapan Terimakasih

Penulis mengucapkan terimakasih kepada Prodi Pendidikan Kimia, Jurusan Kimia, Universitas Negeri Padang yang telah mendukung artikel ini.

Referensi

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