

ARTICLE

(Pemurnian dan Isolasi Selektif Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7CAB Menggunakan Aplikasi Pymol)Devi Tri Lestari¹, Syarial Mangunsong², Ratna Sari³¹Jurusan Matematika, FMIPA, Universitas Asahan (UNA) Kisaran, Indonesia,²Jurusan Pertanian, Fakultas Teknik, Universitas Negeri Medan, Medan, Indonesia³Jurusan Kimia, FMIPA, Universitas Negeri Padang, Padang, IndonesiaE-mail : (ratnasari7288@gmail.com)**ABSTRACT**

Riset ini bertujuan untuk pemurnian dan isolasi selektif protein spike virus sars-cov-2 varian 7cab menggunakan aplikasi pymol. Metode yang digunakan pada riset ini adalah pemodelan molekuler menggunakan aplikasi pymol versi 2.5.2 yang dikeluarkan oleh Schrodinger, LLC. Riset ini memiliki dua kajian yaitu pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang dipakai adalah varian spike virus Sars-Cov-2, yang diperoleh dari website www.pdb.rscb. Analisis komputasi menggunakan perangkat komputer dengan spesifikasi MyBook14E RAM 4,00 GB (3,84 GB usable). Hasil dari riset ini diperoleh varian protein yang diisolasi dan dimurnikan, yaitu protein spike virus sars-cov-2 varian 7CAB. Diperoleh protein varian 7CAB yang berbentuk visualisasi remove waters dan visualisasi ligand. Pemurnian dari isolasi selektif varian 7CAB berhasil memisahkan air dan penotor lain pada protein target.

ARTICLE HISTORY**Submission: 05 April 2022****Received: 21 Mai 2022****Accepted: 02 Juni 2022****Published: 05 Juni 2022****Keywords:** Spike Sars-Cov-2; Varian 7CAB; Pymol**1. Introduction**

Studi komputasi merupakan studi yang digunakan untuk menggambarkan visualisasi menggunakan komputer. Tujuan mempelajari studi komputasi untuk melihat sifat – sifat suatu senyawa dan menyelesaikan masalah kimia. Pemodelan molekul merupakan salah satu bagian dari studi komputasi. Pemodelan molekul dapat digunakan untuk membuat struktur molekul dalam bentuk 3D sehingga dapat dilakukan perhitungan selanjutnya, seperti jumlah energi, panjang ikatan, dan luas permukaan. Namun, hingga saat ini belum banyak mengenai implementasi dalam pemodelan molekul.

Berdasarkan hasil riset, studi komputasi menggunakan perangkat komputer sudah mulai diterapkan pada beberapa aplikasi seperti avogadro dan juga pymol. Avogadro merupakan

aplikasi visualisasi dan editing molekul yang mampu mendesain molekul interaktif dan komunikatif. Sedangkan aplikasi pymol, memiliki kemampuan yang sangat baik dalam menciptakan gambar molekul berkualitas dan dapat merubah nya ke bentuk struktur 3D. Aplikasi pymol dapat digunakan untuk melakukan pemurnian terhadap protein varian spike virus Sars-Cov-2.

Dalam riset ini, mengkaji penggunaan aplikasi pymol untuk melihat struktur murni protein tanpa air dan pengotor lainnya. Kajian itu diterapkan pada salah satu protein varian sars cov-2 yang saat ini sedang menjadi trending topic dunia. Riset ini bertujuan untuk melakukan Pemurnian dan Isolasi Selektif Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7CAB Menggunakan Aplikasi Pymol.

2. Experimental

Perangkat yang digunakan pada riset ini adalah komputer dengan spesifikasi MyBook14E dan RAM 4,00 GB (3,84 GB usable). Sedangkan bahan yang digunakan adalah aplikasi pymol versi 2.5.2 Schrodinger, LLC. Riset ini dilakukan dengan tahapan- tahapan yang secara sistematis dapat digambarkan pada skema berikut ini :

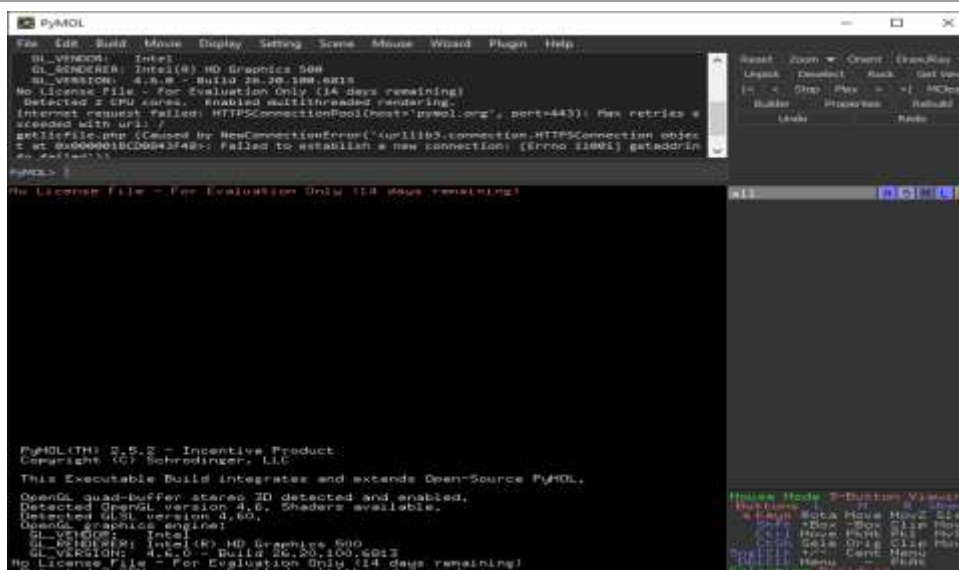


Gambar 1. Skema Kerja

Tahap pemilihan struktur yang akan dikaji dapat dilihat dari situs www.rcsb.pdb yang akan diisolasi selektif menggunakan aplikasi pymol dengan mengklik menu all (A), lalu pilih menu remove waters untuk menghilangkan air. Untuk pemurniannya dilakukan dengan cara mengklik menu all (A), klik preset, kemudian ligan sites dan klik cartoon, kemudian hapus pengotor NAG. Sehingga, diperoleh hasil protein murni tanpa air dan pengotor lainnya.

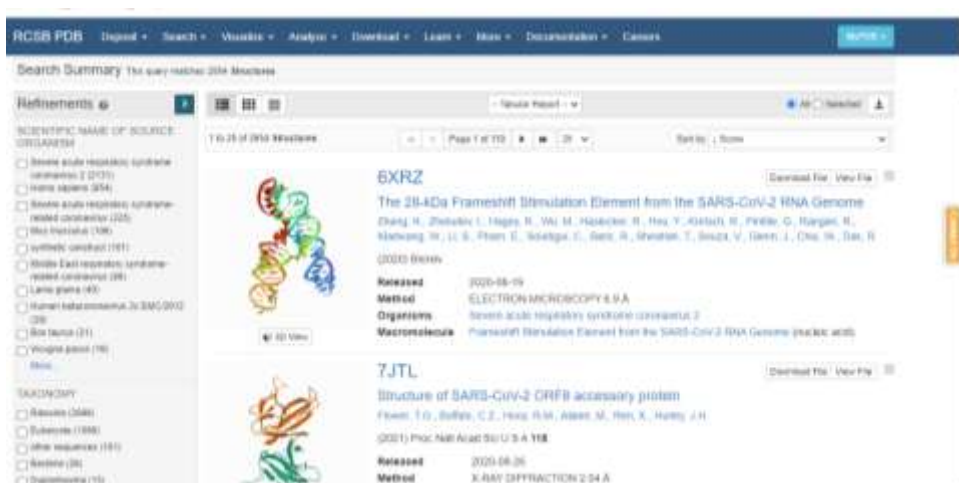
3. Results and discussion

Hasil riset ini diperoleh beberapa pembahasan dari kegiatan yang telah dilakukan untuk pemurnian dan isolasi selektif, seperti pada gambar berikut ini:



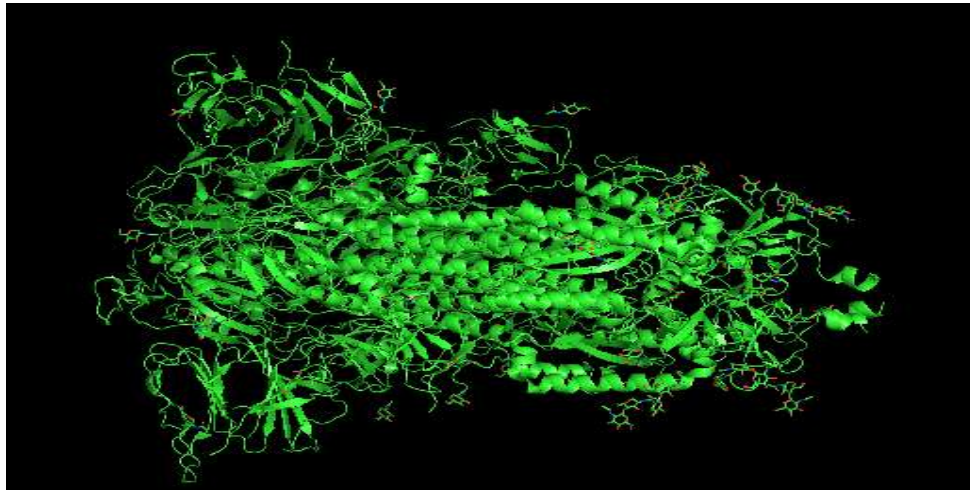
Gambar 2. Tampilan Aplikasi Pymol

Ini merupakan tampilan home dari aplikasi pymol, dimana riset yang akan dilakukan adalah pemurnian dan isolasi selektif protein. Protein yang digunakan adalah protein spike sars-cov-2 yang telah dipilih pada website www.rcsb.pdb. Dimana langkah pertamanya adalah klik menu file, kemudian klik open dan cari protein target yang akan dimurnikan.



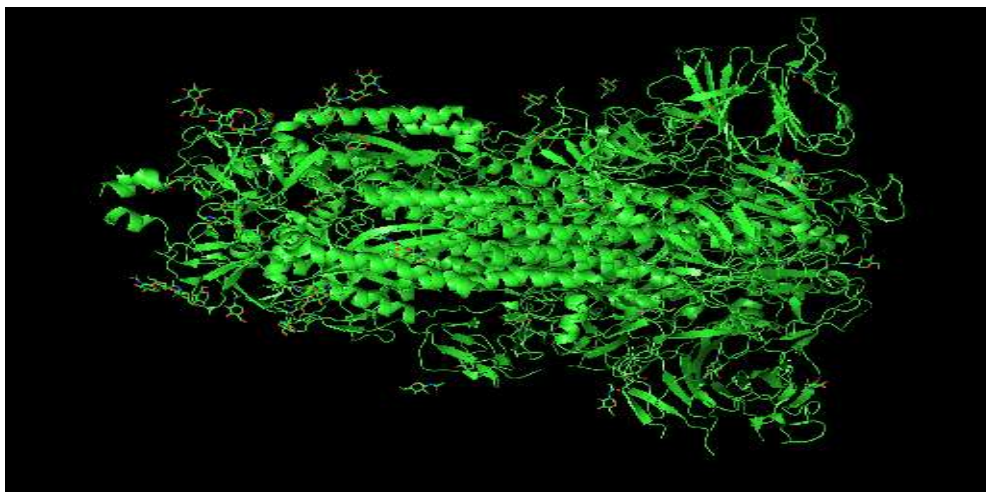
Gambar 3. Visualiaasi Varian Protein pada RSCB PDB

Website untuk mencari protein spike virus sars-cov-2 adalah www.rcsb.pdb. Dimana varian protein yang dipilih adalah varian 7CAB. Setelah memilih varian yang akan dimurnikan, langkah selanjutnya bisa klik menu download dan pilih formatnya berupa cif.



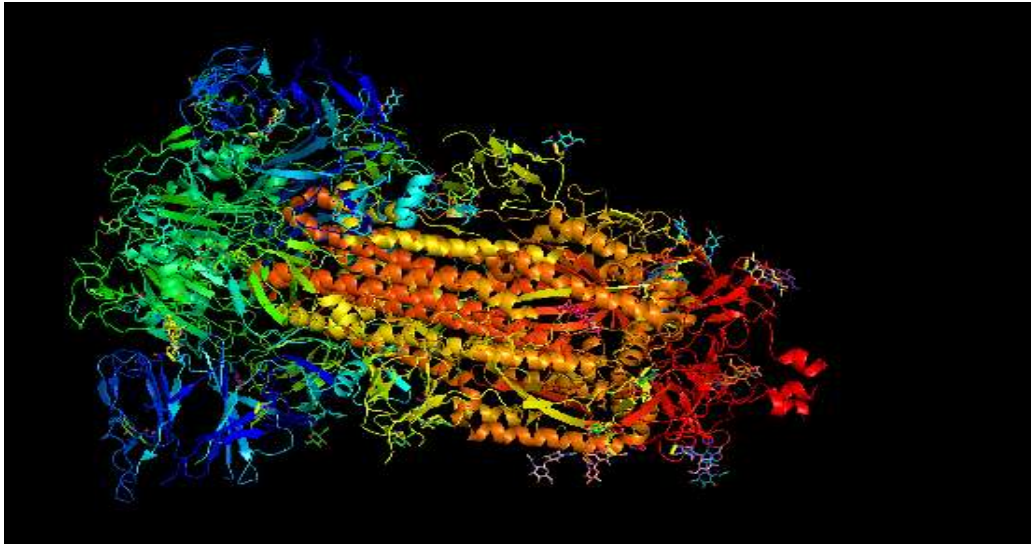
Gambar 4. Visualisasi Varian 7CAB Sebelum Dimurnikan

Ini merupakan visualisasi dari varian 7CAB yang telah didownload sebelumnya kemudian di buka pada aplikasi pymol. Langkah selanjutnya bisa klik S pada sudut kanan bawah, dengan tujuan untuk memperlihatkan sekwen pengotor dan juga air.



Gambar 5. Visualisasi Varian 7CAB yang telah diolasi selektif

Untuk menghilangkan air pada struktur protein tersebut, klik menu all (A), kemudian remove waters.



Gambar 6. Visualisasi Varian 7CAB setelah dimurnikan

Varian 7CAB yang telah dimurnikan akan bebas dari air dan pengotor lainnya. Pemurnian ini dapat dilakukan dengan cara meremove pengotornya yaitu dengan klik all (A), preset, kemudian ligand sites dan klik cartoon. Pengotor yang di remove adalah NAG yang ditandai dengan warna yang berbeda-beda. Tujuan dari kegiatan ini yaitu untuk menghilangkan pengotor dan diperoleh protein murni.

4. Conclusion

Hasil dari riset ini diperoleh protein dengan varian 7CAB yang murni dari air, pengotor lainnya dan juga native ligand. Protein dinyatakan murni ditandai dengan hilangnya titik merah dan hilangnya pengotor atau kontaminan lainnya. Maka riset ini dapat disimpulkan berhasil dengan menggunakan aplikasi Pymol.