

ARTICLE

Analisis Pemurnian dan Molecular Docking Senyawa Aktif *Gamma-mangostine* dari Tumbuhan *Garcinia mangostana* dengan Protease SARS-CoV-2 Omicron Varian 3PY4

Aprima Tasya Nabila^a, Rezha Adiputra^b, Vika Trisna Dwi Putri^{c*}

^aFakultas Kedokteran, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

^bJurusan Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Negeri Jambi, Jambi, Indonesia

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

email: vikatrisna@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan untuk memurnikan dan kajian molecular docking senyawa aktif *Gamma-mangostin* dari tanaman *Garcinia mangostana* dengan protease 3PY4. Metode yang digunakan aplikasi PyMOL versi 1.7.4.5-Win32.msi. dan PyRx versi 0.8 (python.exe) 32 Bit. Kajian dilakukan dengan mengobservasi konformasi 3D pada molekul dan ligand yang digunakan. Perangkat yang digunakan adalah prosesor AMD Dual Core E2-7015 1.5GHz, RAM 4 GB. Protease 3PY4 diambil dari situs protein databank (PDB) (<https://www.rcsb.org/>). Screening molekul aktif menggunakan situs Dr.Duke (www.phytochem.com). Senyawa aktif didapatkan dari Pubchem (www.pubchem.com). Hasil dari eksperimen adalah senyawa aktif dengan SMILES CC=CCC1=CC2=CC=C1OOC3=CC2=OC=CC=C3OOC=CCOC Protease 3PY4 juga berhasil dimurnikan dengan PyMOL. Hasil docking didapatkan nilai Binding Afinitas (kkal/mol) untuk masing-masing RMSD Lower Bond 0,0; 1,249; 3,023; 2,146; 2,676; 3,162; 3,014; 2,354; 3,127. Dan untuk RMSD Upper Bond 0,0; 1,572; 7,321; 7,932; 7,858; 5,252; 8,222; 7,636; 9,089.

Kata Kunci : PyMOL, *Garcinia mangostana*, PyRx, Varian 3PY4

ARTICLE HISTORY

Submission: 4 Mei 2022

Received: 25 Mei 2022

Accepted: 12 Juni 2022

Citation: 21 Maret 2022

Keywords: PyMOL, *Garcinia mangostana*, PyRx, Varian 3PY4

1. Pendahuluan

Tanaman manggis adalah tanaman yang sangat mudah ditemukan di Indonesia, karena merupakan negara tropis yang cocok ditanami tanaman manggis. Tanaman manggis memiliki banyak manfaat, baik dari buah dan daunnya memiliki fungsi yang banyak untuk manusia. Daun manggis (*Garcinia mangostana*) memiliki beberapa manfaat salah satunya yaitu sebagai obat diare dan meredakan panas dalam.

Didalam daun manggis terdapat senyawa-senyawa kimia yang terkandung dalam daun manggis sangat banyak dan memiliki manfaat yang berbeda. Salah satu senyawa yang terdapat dalam daun manggis yaitu *Gamma-mangostin* yang dapat bermanfaat untuk menjaga kekebalan dan daya tahan tubuh. Namun, masih banyak masyarakat yang tidak mengetahui manfaat dari daun manggis tersebut.

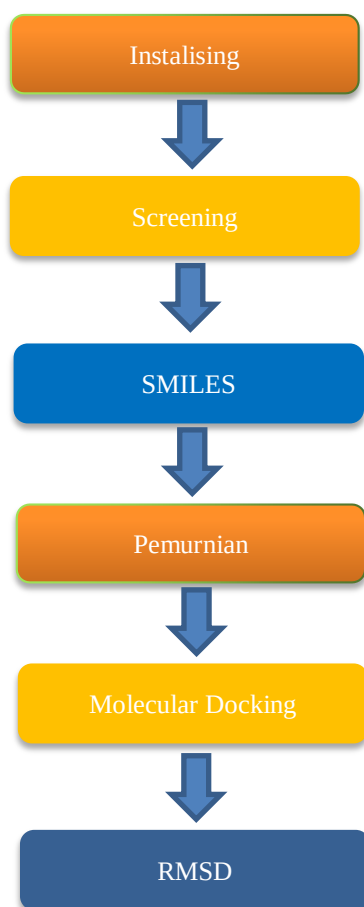
Daun manggis biasanya digunakan sebagai obat tradisional untuk mengobati penyakit. Oleh karena itu, perlu dilakukan investigasi dari senyawa yang terdapat pada daun manggis tersebut. Tujuan dari riset adalah untuk investigasi molekular docking senyawa aktif *Gamma-mangostin* dari tanaman *Garcinia mangostana* dengan protease 3PY4 menggunakan PyMOL dan PyRx.

2. Methode

2.1 Persiapan

Senyawa aktif *Gamma-mangostine* diambil dari situs Dr. Duke (www.phytochem.com). dan SMILES model diperoleh dari situs Pubchem(www.pubchem.com). Uji komputasi dilakukan dengan menggunakan komputer prosesor AMD Dual Core E2-7015 1.5GHz, RAM 4 GB. Dan perangkat lunak yang digunakan yaitu PyMOL versi 1.7.4.5-Win32.msi. dan PyRx versi 0.8 (python.exe) 32 Bit.

2.2 Pelaksanaan



Pelaksanaan dimulai dari menginstal aplikasi PyMOL dan PyRx yang akan digunakan, setelah itu dilakukan Screening molekul aktif menggunakan situs Dr. Duke. Setelah melakukan *screening* dilakukan pencarian SMILES dari senyawa aktif yang digunakan di situs Pubchem. Pemurnian molekul dilakukan pada aplikasi PyMOL yang telah diinstal sebelumnya dan molekul yang telah dimurnikan dilakukan molekular *docking* pada aplikasi PyRx sehingga diperoleh *Binding Afinity* dan RMSD.

2.3 Evaluasi

Hasil visual gambar yang diambil dan dibaca sesuai dengan gambaran yang dilakukan dan data RMSD dan *Binding Affinity* dihubungkan dan dilihat kecenderungannya.

3. Pembahasan

Identifikasi Hasil Pemodelan 3D dan Validasi Struktur 3PY4

Struktur 3D hasil pemodelan 3PY4 yang sudah disterilkan pada aplikasi PyMOL dan telah tebebaskan dari air dan ligan-ligan yang terikat pada protein. Visualisasi hasil pemodelan 3D dengan struktur *cartoons*, *transparent surfaces*, dan seleksi pewarnaan pada protein sekunder dilakukan pada model *envelope 3PY4*.

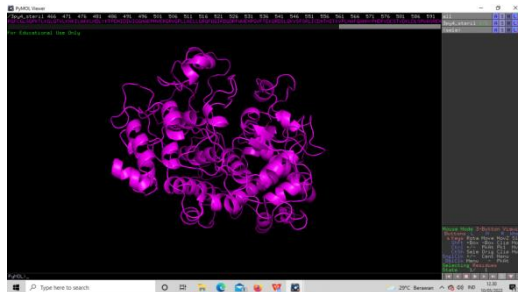


Figure 1. Visualisasi model 3D protein *envelope* virus 3PY4

Apikasi PyRx

Protease yang sudah disterilkan pada software PyMol dilanjutkan dengan aplikasi PyRx dengan cara pengaplikasian Protease 3PY4 dengan ligan dari senyawa aktif yang digunakan. Protease yang sudah steril diinputkan ke dalam PyRx lalu dilakukan molekular surface. Setelah itu, dilakukan autodok dan dibuat makromolekul dari protease steril yang digunakan.

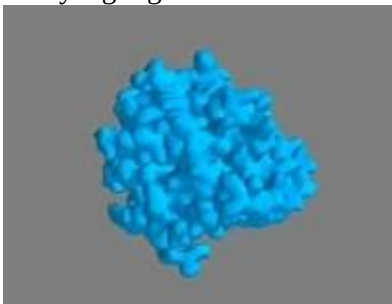


Figure 2. Visualisasi Molekular surface protease 3PY4

Setelah membuat makromolekul, ligan dari senyawa aktif yang digunakan diinputkan ke PyRx untuk diaplikasikan ke makromolekul yang telah dibuat sebelumnya untuk memperoleh binding affinity dan RMSDnya.

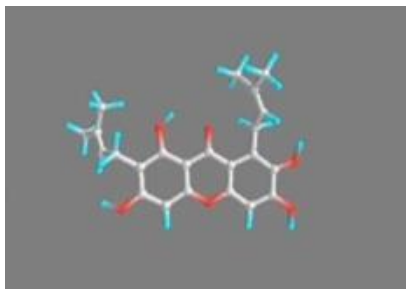


Figure 3. Visualisasi ligan dari senyawa aktif

Binding Afinity dan RMSD

Dari pengaplikasian antara protein 3PY4 dengan ligan dari senyawa aktif yang dilakukan pada software PyRx. Dengan cara membuat makromolekul, lalu makromolekul tersebut direaksikan dengan ligan dari senyawa aktif yang digunakan maka diperoleh harga Binding Afinity dan RMSD dari reaksi tersebut.

Table 1. Binding Afinity dan RMSD

Ligan	Binding Afinity (kcal/mol)	Mode	RMSD lower Bound	RMSD Upper Bound
3py4_steril_5464078_uff_E=408.50	-9.4	0	0.0	0.0
3py4_steril_5464078_uff_E=408.50	-9.3	1	1.249	1.572
3py4_steril_5464078_uff_E=408.50	-9.1	2	3.023	7.321
3py4_steril_5464078_uff_E=408.50	-9.0	3	2.146	7.932
3py4_steril_5464078_uff_E=408.50	-8.7	4	2.676	7.858
3py4_steril_5464078_uff_E=408.50	-8.5	5	3.162	5.252
3py4_steril_5464078_uff_E=408.50	-8.4	6	3.014	8.222
3py4_steril_5464078_uff_E=408.50	-8.3	7	2.354	7.636
3py4_steril_5464078_uff_E=408.50	-8.3	8	3.172	9.089

Berdasarkan data yang diperoleh dapat dilihat bahwa semakin besar nilai RMSD, maka nilai Binding Afinitynya semakin besar. Sebagaimana dapat dilihat dari grafik berikut:

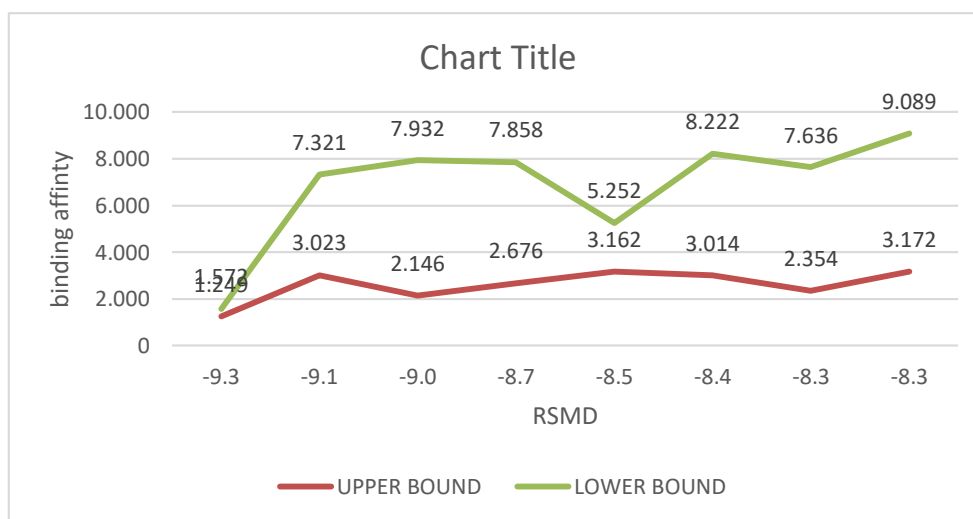


Figure 4. Grafik RMSD terhadap Binding Afinity

4. Kesimpulan

Berdasarkan investigasi yang dilakukan berhasil melakukan molekular docking protein 3PY4. Hasil uji menggunakan PyRx terdapat hubungan semakin besar RMSD semakin kuat Binding Afinity. Pada RMSD=0 atau posisi paling dekat keberadaan ligan dan protein, binding afinity yang dihasilkan adalah -9,4 kkal/mol. Riset lanjutan perlu dilakukan untuk memvalidasi hasil di labolatorium.

