

## ARTICLE

## Pemanfaatan Aplikasi Pymol untuk Isolasi dan Pemurnian Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 7RBY

Aldi Tamara Rahman<sup>a</sup>, Aulia Azhari Febiola<sup>b</sup>, Lathifah Lathifah<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Jurusan Biologi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

<sup>b</sup>Jurusan Psikologi, Fakultas Pendidikan Psikologi dan Kesehatan, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

<sup>c</sup>Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

\*Corresponding email: [Lathifahtifah@gmail.com](mailto:Lathifahtifah@gmail.com)

### ABSTRACT

Riset dilakukan dengan menggunakan aplikasi Pymol oleh Schrödinger, Inc., untuk dilakukan pemurnian dan isolasi terhadap protein spike Sars-Cov-2 varian 7RBY yang dilakukan menggunakan perangkat laptop HP LAPTOP-P9QFSJR4 berprosesor Intel(R) Celeron(R) N4020 CPU @ 1.10GHz 1.10 GHz, RAM 4,00 GB (3,77 GB usable), dan 64-bit operating system, x64-based processor. Proses yang akan dilakukan yaitu penghilangan molekul air dan native ligand dengan tujuan menyiapkan spike protein 7RBY murni agar interaksi ikatan antara reseptor dengan ligand nantinya terjadi secara menyeluruh tanpa ada gangguan faktor lain.

### ARTICLE HISTORY

**Submission:** 3 April 2022

**Revised:** 21 Mei 2022

**Accepted:** 4 Juni 2022

**Published:** 5 Juni 2022

**Citation:** Rahman, Aldi Tamara, Febiola, Aulia Azhari & Lathifah, Lathifah 2022, 'Pemanfaatan Aplikasi Pymol untuk Isolasi dan Pemurnian Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 7RBY', *Jurnal MATH-SMART*, vol. 1, no. 3, hh. 132-140.

**Keywords:** Isolasi; Pemurnian; Protein spike; Pymol; Sars-Cov-2.

### 1. Introduction

Kimia komputasi memberikan terobosan terbaru dalam penelitian untuk memudahkan memprediksi ikatan non-kovalen antara makromolekul (target) dengan molekul kecil (ligan) secara efisien. Prediksi ini penting karena digunakan sebagai virtual screening untuk senyawa yang memiliki potensi sehingga dapat dikembangkan menjadi obat baru. Namun, demikian, perlu adanya studi lebih lanjut di laboratorium secara langsung.

SARS-CoV-2 atau Covid-19 (Corona virus disease) merupakan mutasi dari virus SARS-CoV yang merebak pada tahun 2002 dan MERS-CoV pada 2012. Virus ini menjadi jenis coronavirus ketiga dengan penyebaran yang sangat cepat dan menyerang bagian vital yakni paru-paru.

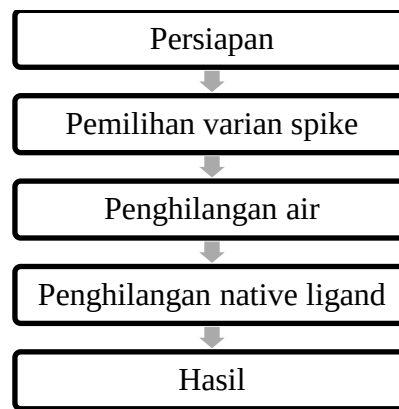
Dalam pembuatan vaksin Sars-Cov-2 dengan banyaknya berbagai varian hasil mutasi virus Sars-Cov-2 perlu dilakukannya pemurnian dan isolasi terlebih dahulu untuk spike protein yang akan diteliti.

Pada tahap ini, untuk Gen yang mengkode protein S (Spike Protein / Gen S) dan Nucleocapsid (Gen N) diisolasi dan diperbanyak dengan menggunakan teknik Polymerase Chain Reaction (PCR).

Untuk melakukan isolasi dan pemurnian spike protein, dilakukan studi secara komputasi melalui aplikasi Pymol untuk melihat bagaimana protein spike varian 7RBY yang didapatkan dari website <https://www.rcsb.org/> dapat dimurnikan dan diisolasi dari molekul air dan native ligandnya sehingga dapat dipersiapkan sebagai protein spike murni yang interaksi ikatan antara reseptor dengan ligand nantinya terjadi secara menyeluruh tanpa ada gangguan faktor lain.

## 2. Experimental

### 2.1 Figure Properties



Gambar 1. Skema langkah penelitian yang akan dilakukan

Peralatan yang digunakan yaitu laptop HP LAPTOP-P9QFSJR4 berprosesor Intel(R) Celeron(R) N4020 CPU @ 1.10GHz 1.10 GHz, software Pymol versi 2.5.2 oleh Schrödinger, Inc

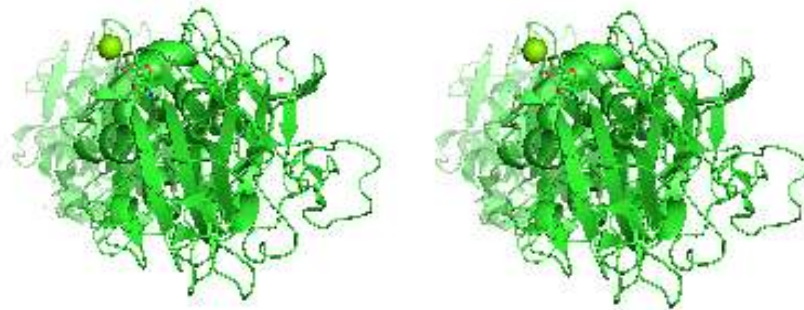
Metode yang digunakan dalam proses ini diawali dengan pemilihan protein spike varian 7RBY yang didapatkan dari website <https://www.rcsb.org/>. Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 7RBY yang didapatkan akan diproses menggunakan aplikasi Pymol untuk menghilangkan molekul air yang ada dan native ligandnya untuk didapatkan protein spike yang murni.

## 3. Results and discussion

### 3.1 Submission Process

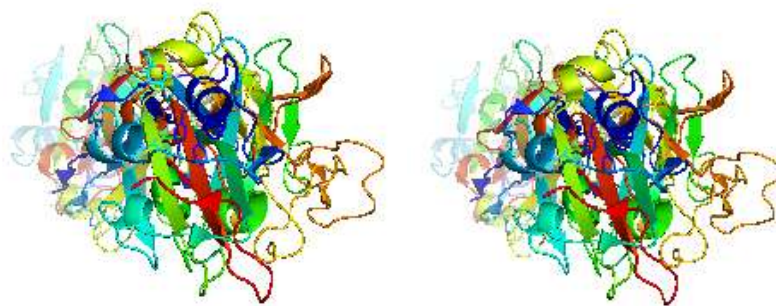
The Pada tahap persiapan, dilakukan installasi aplikasi pymol pada perangkat keras laptop HP LAPTOP-P9QFSJR4 berprosesor Intel(R) Celeron(R) N4020 CPU @ 1.10GHz 1.10 GHz.

Spike protein varian 7RBY yang telah diseleksi, diunduh dalam format .cif dari website <https://www.rcsb.org/>, dan dibuka menggunakan aplikasi Pymol untuk selanjutnya dilakukan isolasi dan pemurnian.



**Gambar 2. (a) Spike protein Varian 7RBY awal. (b) Spike protein Varian 7RBY yang telah dihilangkan airnya**

Proses isolasi dan pemurnian awal dilakukan dengan penghilangan molekul air dengan menggunakan menu “*Remove waters*”. Setelah itu, protein spike dibersihkan dari *native* ligandnya yang dapat mengganggu.



**Gambar 3. (a) Spike protein Varian 7RBY yang telah dihilangkan airnya dengan preset cartoon (b) Spike protein Varian 7RBY yang telah dihilangkan airnya dengan preset cartoon**

Hasil yang didapatkan berupa visualisasi Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 7RBY tanpa air dan visualisasi Protein Spike Sars-Cov-2 Varian 7RBY murni tanpa air serta *native* ligand dalam format .cif yang nantinya dapat digunakan dalam penelitian lanjutan interaksi molekular *docking* secara dinamis.

#### 4. Conclusion

Dari proses yang telah dilakukan, protein spike Sars-Cov-2 varian 7RBY berhasil diisolasi dan dimurnikan dalam bentuk protein tanpa air dan *native* ligand. Hasil yang didapatkan berupa visualisasi spike protein varian 7RBY tanpa air dan spike protein varian 7RBY tanpa air serta *native* ligandnya. Penelitian lanjutan dapat dilakukan nantinya pada tahapan interaksi molekular *docking* secara dinamis.