

Visualisasi Proses Pemurnian dan Isolasi Sebagian Pada Protein Spike Virus Sars-Cov 2 varian 7EK6 dengan aplikasi pymol

Selsa Arlini¹Frayengka Alfaga²Rainy Setia Ningsih³

¹Pendidikan Kedokteran, Fakultas Kedokteran, Universitas HKBP Nommensen, Medan, Indonesia

²Teknik Elektro dan Industri, Fakultas Teknik, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

³Pendidikan Kimia, Departemen Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

rainysetianingsih@gmail.com

Abstrak

Riset ini mengkaji tentang komputasi mengenai pemurnian dan isolasi protein spike virus Sars-Cov-2 varian 7EK6 menggunakan aplikasi PyMol. Metode yang saya gunakan dalam penelitian ini yaitu pemodelan molekuler dengan *software* PyMol versi 2.5.2 dikeluarkan oleh Schrodinger. Perangkat yang digunakan acer Aspire 3 A314-32-C4WL. . Dalam melakukan penelitian ini terdapat beberapa tahapan. Pertama, dilakukan pemilihan spike protein yang akan digunakan pada situs <https://www.rcsb.org/>. Protein yang digunakan adalah varian spike Sars-Cov-2 varian 7EK6. Tahap selanjutnya, dilakukan pemurnian dan isolasi selektif dengan menggunakan aplikasi PyMol. Pemurnian dilakukan terlebih dahulu dengan cara *remove waters*, kemudian sele dan menghapus natif ligan, kemudian *preset* dan dipilih *cartoon*. Hasil yang didapatkan dari proses ini adalah protein murni spike virus Sars-Cov-2 varian 7EK6 dengan struktur yang bebas air, bebas natif ligan dan bebas pengotor lainnya.

Kata Kuncinya : Sars-Cov-2, Spike, Implementasi, Aplikasi Pymol, Pemurnian protein 7EK6

Pendahuluan

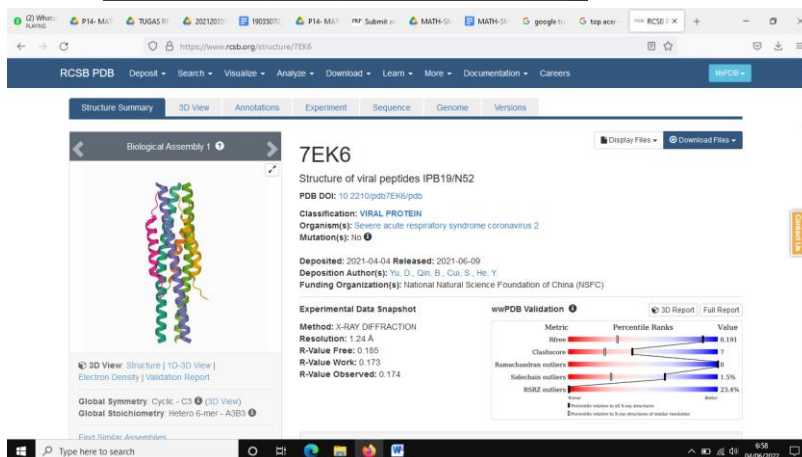
Studi komputasi merupakan peran penting dalam penelitian ini. Studi komputasi dapat menjelaskan visualisasi molekul kecil maupun molekul besar seperti protein. salah satu protein yang diteliti adalah Protein Spike Virus Sars-Cov-2. Penelitian ini menggunakan aplikasi pymol menggunakan laptop dengan processor AMD Ryzen 3 2200U with Radeon VegaMobile Gfx2.50 GHz.

Berdasarkan hasil riset yang dilakukan salah satu aplikasi studi komputasi, salah satu aplikasi pada studi komputasi adalah Avogadro, Hyperchem. Hyperchem aplikasi yang mudah digunakan karena aplikasi ini memiliki sifat yang langsung bisa menunjukkan struktur apa yang akan kita buat. Struktur senyawa yang dihasilkan sangat jelas dan juga dari aplikasi ini mendapatkan hasil dalam bentuk gambar 3 dimensi. Namun terdapat juga aplikasi lain pada studi komputasi yakni Pymol. Aplikasi ini merupakan program visualisasimolekul yang dapat memberikan kualitas gambar 3 dimensi yang baik dari molekul yang dihasilkan.

Dalam riset ini yang dikaji adalah visualisasi pemurnian dan Isolasi Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7EK6 menggunakan aplikasi Pymol pada proses Pemurniannya. Aplikasi ini digunakan untuk memurnikan sars-cov-2 yang sedang banyak dibicarakan, PyMOL merupakan salah satu software yang digunakan untuk visualisasi suatu struktur biologi serta dapat menampilkan gambar dalam struktur 3 dimensi yang baik . Selain itu PyMOL juga dapat menyajikan tampilan struktur dan warna dari suatu molekul, dari molekul terkecil hingga makromolekul seperti protein. Tujuan dari riset ini adalah untuk Visualisasi Proses Pemurnian dan Isolasi Sebagian Pada Protein Spike Virus Sars-Cov 2 varian 7EK6 dengan aplikasi pymol dengan menggunakan metode komputasi.

METODOLOGI

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 adalah acer Aspire 3 A314-32-C4WL.



Gambar 1a. Aplikasi PyMol (Istimewa)

Gambar 1b. Website RCSB PDB (Istimewa)

Gambar 1. Peralatan yang Digunakan dalam Penelitian (Istimewa)

Penelitian ini diawali dengan pemilihan struktur protein Sars-Cov-2 yang diambil dari website <https://www.rcsb.org/>. Struktur yang akan diisolasi didownload melalui website tersebut

dengan format PDBx/mmCIF Format. Kemudian struktur tersebut diisolasi sebagian menggunakan aplikasi PyMol. Isolasi sebagian spike protein dimulai dengan menghilangkan air dengan cara klik *Action* (A), lalu pilih *remove waters* sehingga protein bebas dari air. Selanjutnya pada tahap pemurnian, spike protein yang sudah diisolasi sebagian dihilangkan dari natif ligan sehingga protein bebas dari natif ligan, caranya yaitu dengan klik S (*Sele*) untuk menampilkan kodon ligan kemudian digeser ke kanan dan hapus natif ligan. Langkah terakhir yaitu klik *Action*, pilih *Preset*, pilih *Ligan sites*, lalu pilih *Cartoon*, maka terlihat protein yang sudah dimurnikan tanpa pengotornya.