

Visualisasi Proses Pemurnian dan Isolasi Sebagian Pada Protein Spike Virus Sars-Cov 2 varian 7N0R dengan aplikasi pymol

Selsa Arlini¹Frayengka Alfaga²Nindy Aprillia Rindiany³

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

²Teknik Elektro dan Industri, Fakultas Teknik, Universitas Negeri Padang (UNP) Padang, Indonesia

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

aprilliarindiany@gmail.com

Abstrak

Penelitian ini mengkaji komputasi purifikasi dan isolasi virus spike protein Sars-Cov-2 varian 7N0R menggunakan aplikasi PyMol. Metode yang saya gunakan dalam penelitian ini adalah pemodelan molekul menggunakan software PyMol versi 2.5.2 yang diterbitkan oleh Schrödinger. Perangkat yang digunakan adalah Acer Aspire A514-54. . Ada beberapa tahapan dalam melakukan penelitian ini. Pertama, spike protein dipilih untuk digunakan di situs web <https://www.rcsb.org/>. Protein yang digunakan adalah varian spike Sars-Cov-2 7N0R. Tahap selanjutnya adalah pemurnian dan isolasi selektif menggunakan aplikasi PyMol. Pemurnian dilakukan dengan menghilangkan air terlebih dahulu, kemudian memilih dan menghilangkan ligan asli, kemudian *presetting* dan memilih *cartoon*. Hasil yang diperoleh dari prosedur ini adalah virus spike protein murni Sars-Cov-2 varian 7N0R dengan struktur bebas air, bebas ligan asli dan bebas pengotor lainnya.

Kata Kuncinya : Sars-Cov-2, Spike, Implementasi, Aplikasi Pymol, Pemurnian protein 7N0R

Pendahuluan

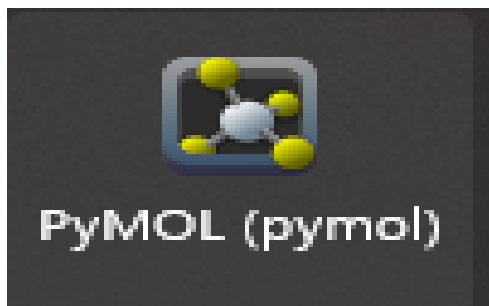
Studi komputasi memainkan peran penting dalam penelitian ini. Studi komputer dapat menjelaskan visualisasi molekul kecil serta molekul besar seperti protein. Salah satu protein yang diteliti adalah protein spike virus Sars-Cov-2. Penelitian ini menggunakan aplikasi Pymol menggunakan komputer laptop yang dilengkapi dengan prosesor Intel(R) Core(TM) i3-1115G4 generasi ke-11 3,00 GHz 3,00 GHz.

Berdasarkan hasil penelitian yang dilakukan oleh sebuah aplikasi studi komputer, salah satu aplikasi dalam studi komputer adalah Avogadro, Hyperchem. Aplikasi Hyperchem mudah digunakan karena aplikasi ini memiliki fitur yang dapat langsung menunjukkan struktur apa yang akan kita buat. Struktur senyawa yang dihasilkan sangat jelas dan hasil aplikasi ini juga mengarah pada pembentukan gambar tiga dimensi. Namun, ada kegunaan lain dalam studi komputer, yaitu Pymol. Aplikasi ini merupakan program visualisasi molekul yang dapat memberikan gambar tiga dimensi berkualitas tinggi dari molekul yang dihasilkan.

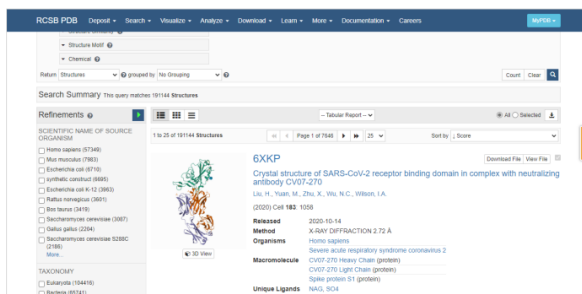
Yang dipelajari dalam penelitian ini adalah menggunakan aplikasi Pymol dalam proses pemurnian untuk memvisualisasikan pemurnian dan isolasi protein virus spike Sars-Cov-2 varian 7N0R. Aplikasi ini digunakan untuk membersihkan Sars-Cov-2 yang banyak dibicarakan. PyMOL adalah salah satu perangkat lunak yang digunakan untuk memvisualisasikan struktur biologis dan dapat membuat gambar dalam struktur 3D yang sangat baik. Selain itu, PyMOL dapat mewakili struktur dan rendering warna molekul, dari molekul terkecil hingga makromolekul seperti protein. Penelitian ini bertujuan untuk memvisualisasikan proses pemurnian dan isolasi parsial protein virus spike Sars-Cov-2 7N0R dengan pemberian Pymol menggunakan teknik 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 A514-54.



Gambar 1a. Aplikasi PyMol (Istimewa)



Gambar 1b. Website RCSB PDB (Istimewa)

Gambar 1. Peralatan yang Digunakan dalam Penelitian (Istimewa)

Penelitian diawali dengan pemilihan struktur protein Sars-Cov-2 dari situs <https://www.rcsb.org/>. Struktur yang akan dipisahkan diunduh dari situs web dalam format PDBx / mmCIF. Kemudian struktur dipisahkan sebagian menggunakan aplikasi PyMol. Isolasi parsial protein kuku dimulai dengan penghilangan 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.