

ARTICLE

Evaluasi Pemodelan Molekular dengan PyMol pada Pemurnian dan Isolasi Protein Spike Virus Sars-Cov-2 Varian 7FCD

Chen Xiu Na^a, Atikah Martina^b, Yona Ramada Yanti^c, Damiyanti Damiyanti^d

^aIlmu Kedokteran, Fakultas Kedokteran, Zhunyi Medical University, China

^bTeknik Industri, Fakultas Teknik, Universitas Pamulang, Indonesia

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

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

*Corresponding email: 12damiyanti@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan untuk mengisolasi pemurnian protein spike sars-cov-2 dengan menggunakan aplikasi Pymol. Metode yang digunakan pada riset ini adalah pemodelan molekul dengan menggunakan *software* Pymol dengan spesifikasi perangkat yang digunakan versi 2.5.2, menggunakan perangkat komputer Asus dengan spesifikasi *processor* AMD E2-7015 APU with AMD *Radeon R2 Graphics* 1.50 GHz. Riset ini memiliki dua kajian yakni pemurnian dan isolasi protein. Hasil yang di dapatkan pada riset ini adalah visualisasi varian, protein yang belum dimurnikan, protein yang sudah di *remove water*, dan protein yang sudah dimurnikan dalam varian spike 7FCD virus Sars-Cov-2.

ARTICLE HISTORY

Submission: 18 April 2022

Revised: 27 Mei 2022

Accepted: 03 Juni 2022

Published: 05 Juni 2022

Citation:

Keywords: PyMol; Sars-Cov-2; Spike Protein; Varian Spike 7FCD

1. Introduction

Pemodelan molekul merupakan salah satu aspek yang sangat penting dalam riset ini. Pemodelan molekul ini memberikan visualisasi sebuah molekul, dimana pada penelitian ini sangat memberikan manfaat terhadap visualisasi yang akan di teliti.

Berdasarkan hasil riset yang telah di lakukan salah satu aplikasi pemodelan molekul yang telah digunakan adalah Hyperchem. Hyperchem merupakan aplikasi yang menjelaskan tentang visualisasi

Riset ini akan menjelaskan mengenai evaluasi pemodelan molekular dengan pymol pada pemurnian dan isolasi protein spike virus sars-cov-2. Aplikasi Pymol ini merupakan salah satu aplikasi yang sering digunakan dalam penelitian visualisasi pemurnian protein. Dimana hasil yang di dapatkan dari penggunaan aplikasi Pymol berbentuk visualisasi yang memiliki warna dan struktur yang jelas.

2. Experimental

Peralatan yang dipakai adalah perangkat komputer dengan spesifikasi *prosessor* AMD E2-7015 APU *with* AMD Radeon R2 *Graphics* 1.50 GHz, dan *Software* PyMol versi 2.5.2

Riset ini diawali dengan menyiapkan struktur. Pada tahap ini struktur virus sars-cov-2 diambil melalui situs <https://www.rcsb.org/> Struktur yang sudah didownload dilakukan pemurnian menggunakan *software* Pymol versi 2.5.2. Pemurnian ini dilakukan dengan cara menarik struktur yang telah di download melalui menu “*file*” pada aplikasi pymol. Struktur yang telah di tarik dilakukan pemurnian dengan cara klik tool “*remove water*”. Setelah “*remove water*” dilakukan maka struktur protein yang dihasilkan akan dimurnikan kembali, dengan cara menekan “*preset dan cartoon*” pada icon A di aplikasi pymol.

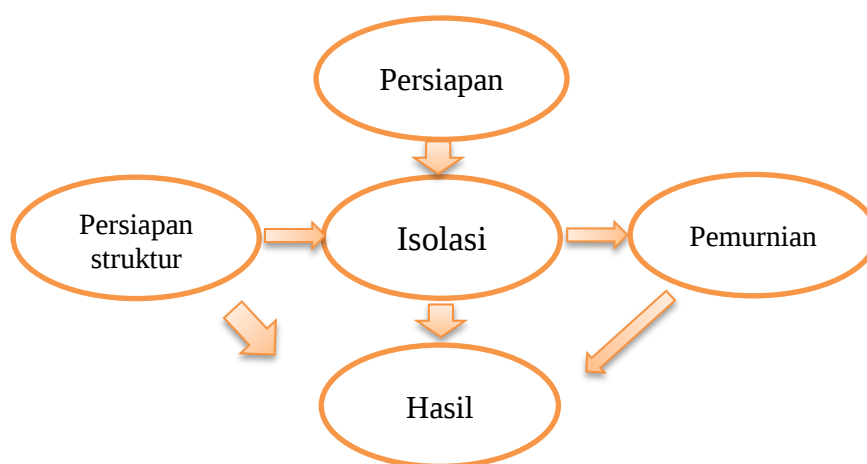


Fig. 1. Skema Kerja

3. Results and discussion

Struktur awal virus sars-cov-2 yang diperoleh dari situs <https://www.rcsb.org/>, masih belum murni yang ditandai dengan terdapatnya titik merah pada struktur. Titik merah ini menandakan bahwa struktur protein masih mengandung air, seperti yang terlihat pada gambar 2

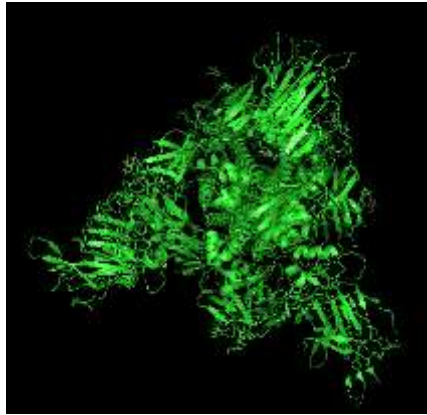


Fig. 2. Spike protein belum murni dari air

Air yang menempel pada spike protein dihilangkan dengan cara klik tool *“remove water”* sehingga titik titik merah pada struktur hilang. Maka struktur yang seperti ini sudah dinyatakan murni dari air yang menempel, seperti yang terlihat pada gambar 3.

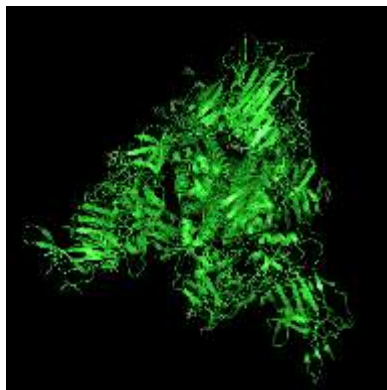


Fig. 3. Spike protein murni dari air

Spike protein yang telah murni dari air, akan dimurnikan lagi untuk menghilangkan *native* ligand dan pengotor lainnya. Pemurnian ini dilakukan dengan menekan tombol *“preset dan cartoon”* pada icon A di aplikasi pymol. Dimana hasil pemurnian ini dapat dilihat pada gambar 4.

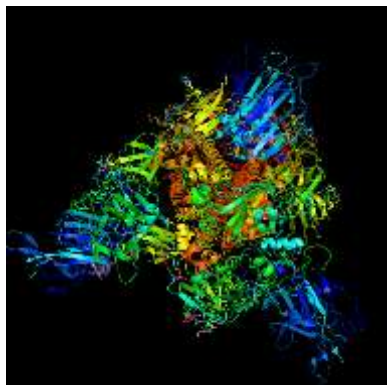


Fig. 4. Spike protein murni

Protein yang telah berhasil di isolasi dan di murnikan siap untuk di simpan dengan format “PDB”

4. Conclusion

Evaluasi aspek pemodelan molekul pada protein spike virus sars-cov-2 varian 7FCD menggunakan *software* pymol dilakukan dengan melalui tahap penyiapan struktur, isolasi, dan pemurnian. Penelitian ini telah berhasil memurnikan dan mengisolasi selektif protein spike varian 7FCD. Hasilnya dalam bentuk protein tanpa air, *native* ligand, dan protein tanpa pengotor lainnya. Penelitian lanjutan diperlukan untuk memvalidasi secara laboratorium.

References

- [1] J. Clerk Maxwell, A Treatise on Electricity and Magnetism, 3rd ed., vol. 2. Oxford:Clarendon Press, 1892, pp.68-73. (Book)
- [2] H. Poor, An Introduction to Signal Detection and Estimation, New York: Springer-Verlag, 1985, ch. 4. (Book Chapter)
- [3] Y. Yorozu, M. Hirano, K. Oka, and Y. Tagawa, “Electron spectroscopy studies on magneto-optical media and plastic substrate interface”, IEEE Transl. J. Magn. Japan, vol. 2, pp. 740-741, August 1987. (Article)
- [4] E. Kabalcı, E. Irmak, I. Çolak, “Design of an AC-DC-AC converter for wind turbines”, International Journal of Energy Research, Wiley Interscience, DOI: 10.1002/er.1770, Vol. 36, No. 2, pp. 169-175. (Article)
- [5] I. Çolak, E. Kabalci, R. Bayindir R., and S. Sagirolu, “The design and analysis of a 5-level cascaded voltage source inverter with low THD”, 2nd PowerEng Conference, Lisbon, pp. 575-580, 18-20 March 2009. (Conference Paper)
- [6] IEEE Standard 519-1992, Recommended practices and requirements for harmonic control in electrical power systems, The Institute of Electrical and Electronics Engineers, 1993. (Standards and Reports)