

ARTICLE

(Penggamban Aspek Pemurnian dan Isolasi Sebagian pada Protein Varian 6ZXX Spike Virus Sars-Cov-2 dengan Pymol)

Reinaldy Kurnian FE^a, Mutiara Maulani^b, Septila Fani. S^c

^aTeknik Kimia, Fakultas Teknik Universitas Syiah Kuala (UNSYIAH), Aceh, Indonesia

^bPendidikan Fisika, Fakultas Pendidikan, Universitas Negeri Jambi (UNJA), Jambi, Indonesia

^cPendidikan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Padang (UNP), Padang, Indonesia

Email: septilafanis5@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan untuk melihat Penggambaran Aspek Pemurnian dan Isolasi Sebagian pada Protein Varian 6ZXX Spike Virus Sars-Cov-2 dengan menggunakan aplikasi Pymol. Metode yang digunakan dalam riset ini adalah pemodelan molekuler menggunakan aplikasi PyMol versi 2.5.2 Schrodinger. Riset ini memiliki dua kajian yaitu pemurnian dan isolasi sebagian pada protein. Protein yang dikaji adalah protein varian spike virus Sars-Cov-2, yang diambil dan dipilih dari web online yaitu www.pdb.rscb. Analisis komputasi menggunakan perangkat computer DESKTOP-8TREUOC dengan spesifikasi, Windows 10 Pro, Versi 21H2 dengan RAM sebesar 2.00 GB. Hasil dari riset ini diperoleh varian protein yang diisolasi dan dimurnikan, yaitu protein spike virus sars-cov-2 varian 6ZXX. Diperoleh protein varian 6ZXX yang berbentuk visualisasi remove waters dan visualisasi ligand. Pemurnian dan Isolasi Sebagian Varian 6ZXX berhasil memisahkan air dan pengotor lain pada protein target.

ARTICLE HISTORY

Submission: 05 April 2022

Revised: 22 Mei 2022

Accepted: 02 Juni 2022

Published: 05 Juni 2022

Citation:

Keywords: Spike Virus Sars-Cov-2; Varian 6ZXX; PyMol; Pemurnian; Isolasi Sebagian.

1. Pendahuluan

Pembelajaran komputasi adalah disiplin ilmu kimia yang memiliki peranan paling penting dalam riset pembelajaran kimia. Disiplin ilmu komputasi ini mampu menyelesaikan permasalahan kimia dengan menerapkan pemrograman dan ilmu matematika. Studi komputasi adalah pembelajaran yang menerapkan perangkat komputer untuk menggambarkan molekuler secara 3D dengan kualitas tinggi sehingga mempermudah perhitungan selanjutnya. Pada riset saat ini, yang dikaji adalah pemodelan molekuler protein, yaitu protein spike virus sars-cov-2 dengan varian tertentu. Namun implementasi permodelan molekuler yang ditemui di lapangan yang ditemui belum optimal dilakukan dengan menggunakan perangkat komputer sehingga penerapannya belum maksimal dan masih terbatas.

Berdasarkan hasil riset yang telah dilakukan, studi komputasi menggunakan perangkat computer sudah ada diterapkan pada beberapa aplikasi seperti HyperChem, Avogadro, dan PyMol. HyperChem adalah aplikasi kimia komputasi yang digunakan untuk menggambarkan struktur kimia, optimasi geometri, dan perhitungan kimiawi yang kompleks. Avogadro adalah aplikasi visualisasi dan editing molekul yang memungkinkan desain molekul interaktif tiga dimensi untuk dilihat dari hamper segala

sudut. Dan PyMol adalah aplikasi computer yang dapat menghasilkan gambar 3D berkualitas tinggi dari molekul kecil dan makromolekul biologis, seperti protein.

Dalam riset ini dikaji penggunaan aplikasi PyMol untuk melihat visualisasi dari hasil kegiatan pemurnian dan isolasi sebagian pada protein. Kajian ini diterapkan pada salah satu protein varian sars-cov-2 yang saat ini sedang menjadi trending topic didunia. Dimana riset ini bertujuan untuk menggambarkan Aspek Pemurnian dan Isolasi Sebagian pada Protein Varian 6ZXXN Spike Virus Sars-Cov-2 dengan menggunakan aplikasi Pymol.

2. Metode

Perangkat yang digunakan adalah computer DESKTOP-8TREUOC dengan spesifikasi, Windows 10 Pro, Versi 21H2 dengan RAM sebesar 2.00 GB. Software PyMol versi 2.5.2 Schrodinger dan Situs Protein Data Bank (PDB). Riset ini dilakukan dengan tahapan-tahapan secara sistematis sebagaimana terlihat pada skema pada gambar 1.

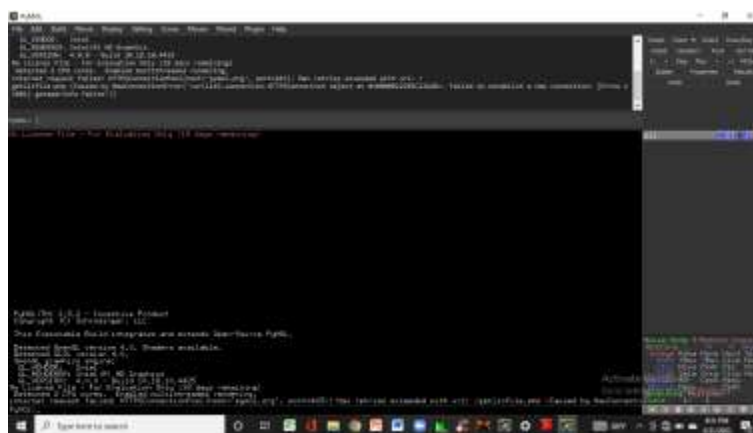


Gambar 1. Skema Kerja

Tahap pemilihan struktur yang akan dikaji didapat dari situs <https://www.rcsb.pdb> yang akan diisolasi sebagian menggunakan software PyMol dengan mengklik all (A), lalu pilih remove waters. Lalu dimurnikan dengan cara menghilangkan pengotornya berupa NAG setelah mengklik all (A)-preset-ligand sites-cartoon. Sehingga diperoleh hasil protein murni tanpa air dan pengotornya.

3. Hasil dan Pembahasan

Hasil riset diperoleh enam bahasan dari kegiatan permodelan dan isolasi sebagian seperti pada gambar berikut.



Gambar 2. Tampilan PyMol

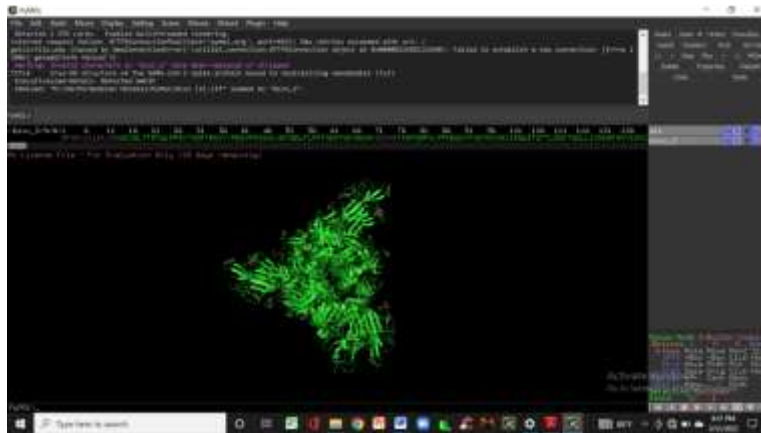
Ini adalah tampilan dari aplikasi PyMol, dimana riset yang akan dilakukan saat ini adalah pemurnian dan isolasi sebagian protein. Protein yang digunakan adalah protein spike sars-cov-2 yang dipilih dan

didownload pada web www.rcsb.pdb. Dimana langkah pertamanya adalah mengklik file-open-dan buka file cif varian protein target.



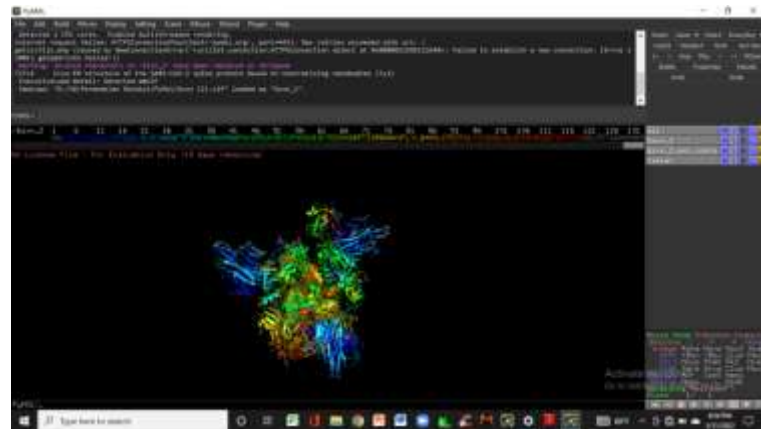
Gambar 3. Visualisasi Varian Protein pada RSCB PDB

RSCB PDB adalah web online untuk memilih dan mendownload varian protein target, yaitu varian 6ZXN. Ini adalah tampilan dari varian 6ZXN yang akan dikaji pemurnian dan isolasi sebagiannya. Setelah varian nya dipilih, langkah selanjutnya didownload dan pilih formatnya berupa cif.



Gambar 4. Visualisasi Varian 6ZXN sebelum dimurnikan

Ini adalah visualisasi dari varian 6ZXN yang telah didownload pada web RSCB PDB pada aplikasi PyMol. Langkah selanjutnya adalah klik Sele (S) pada sudut kanan bawah. Tujuan dari mengklik Sele (S) ini adalah untuk memperlihatkan data-data pengotor dan nilainya.



Gambar 5. Visualisasi Varian 6ZXN yang telah diisolasi sebagian

Ini adalah visualisasi dari varian 6ZXX yang telah diisolasi sebagian dengan cara mengklik all (A)-remove waters. Tujuan dari kegiatan ini adalah untuk menghilangkan air (H₂O) pada protein varian 6ZXX yang dikaji.



Gambar 6. Visualisasi Varian 6ZXX saat dimurnikan

Ini adalah visualisasi dari varian 6ZXX saat dimurnikan dengan cara mengremove pengotornya setelah diklik all (A)-preset-ligand sites-cartoon. Pengotor yang diremove adalah NAG yang tidak memiliki nilai. Tujuan dari kegiatan ini yaitu untuk menghilangkan setiap pengotor yang ada dan diperoleh hasil yang murni.

4. Kesimpulan

Riset ini telah berhasil memurnikan dan mengisolasi sebagian protein virus sars-cov-2 varian 6ZXX. Hasil dari pemurnian dan isolasi sebagian yang telah dilakukan berupa protein murni yang telah murni dari air, natif ligand dan pengotor lainnya. Protein murni yang dihasilkan ditandai dengan hilangnya titik merah pada struktur molekul, sempurna dari segi bentuk dan warna protein yang menjadi target. Riset lanjutan diperlukan untuk memvalidasi secara laboratorium.

Ucapan Terimakasih

Puji syukur kepada Allah SWT dengan rahmat-Nya, penulis dapat menyelesaikan paper ini. Terimakasih penulis ucapkan kepada kedua orang tua atas dukungan yang diberikan sehingga penulis dapat menyelesaikan paper ini. Terimakasih juga penulis ucapkan kepada teman-teman yang sudah memberikan bantuan dan motivasinya dalam penulisan paper ini.