

ARTICLE

(Implementasi Penggunaan Aplikasi PyMol untuk Pemurnian dan Isolasi pada Protein Varian Spike 6ZGH Sars-Cov-2)

Dyah Anggraeni Ayuningtyas^a, Husnul Amelia Elkhaima^b, & Wiandi Melati Putri^c

^akonstruksi Kapal, Teknik Perkapalan, Universitas Diponegoro, Semarang, Indonesia

^bPendidikan Profesi Dokter, Kedokteran, Universitas Andalas, Padang, Indonesia

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

Email: wiandimelatiputri@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan menganalisis implementasikan penggunaan aplikasi PyMol pada pemurnian dan isolasi selektif pada protein varian spike 6ZGH Sars-Cov-2. Metode yang digunakan adalah pemodelan molekul dengan aplikasi PyMol pada pemurnian dan isolasi selektif. Aplikasi PyMol yang digunakan aplikasi PyMol versi 2.5.2 yang dikeluarkan oleh Scodinger. Aspek kajian dalam riset ini adalah pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang dipakai adalah protein varian spike virus Sars-Cov-2. Yang disiapkan dari website purchem <https://www.rscb.org>. Analisis pemodelan molekul ini menggunakan perangkat keras komputer dengan spesifikasi Intel® Celeron® CPU N3350 @ 1.10GHz 1.10GHz, dengan Installed RAM 2,00 GB (1,83 GB usable). Hasil yang didapatkan dari varian yang diisolasi dan dimurnikan adalah protein murni varian spike 6ZGH Sars-Cov-2. Hasil riset ini, diperoleh protein varian 6ZGH yang berbentuk struktur bebas air, ligan natif dan pengotor lain pada protein target..

ARTICLE HISTORY

Submission: 05 April 2022

Revised: 22 Mei 2022

Accepted: 02 Juni 2022

Publised: 05 Juni 2022

Citation:

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

1. Pendahuluan

Studi pemodelan molekul merupakan kajian utama pada riset pemurnian dan isolasi sebagian protein spike Sars-Cov-2. Studi pemodelan molekul merupakan kajian yang digunakan untuk menggambarkan visualisasi menggunakan komputer. Pada riset ini, yang akan dibahas adalah pemodelan molekul protein, yaitu protein spike virus Sars-Cov-2 dengan varian yang telah ditentukan. Dahulu, studi pemodelan molekul cukup dengan menggunakan mekanika fisika klasik, dengan menggunakan sebuah pensil, kertas, dan kalkulator tangan. Kini studi pemodelan molekul terkait erat dengan pemodelan komputer, karena komputasi telah mengevolusi pemodelan molekul menjadi lebih luas lagi. Namun, implementasi molekuler dan pemodelan belum banyak dan juga belum optimal dan masih terbatas pada praktiknya.

Berdasarkan hasil observasi dan riset, studi komputasi pemodelan sudah banyak dilakukan. Diantaranya dengan aplikasi Chemcraf, HyperChem dan PyMol. Chemcraf merupakan software yang dapat digunakan untuk visualisasi molekul atau kristal. Hyperchem adalah suatu program simulasi dan pemodelan molekuler yang memungkinkan perhitungan kimiawi yang kompleks. Sedangkan PyMol merupakan salah satu program visualisasi molekuler open source powerful saat ini. PyMol banyak

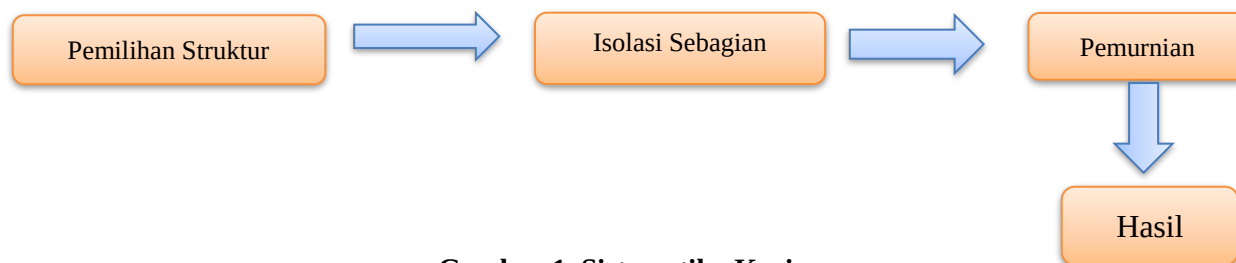
digunakan untuk menyiapkan gambar berkualitas publikasi, untuk membagikan hasil interaktif, atau untuk menghasilkan animasi yang telah dirender sebelumnya.

Dalam riset ini dikaji implementasi penggunaan aplikasi PyMol untuk pemurnian dan isolasi selektif protein spike. kajian ini diterapkan pada salah satu varian virus Sars-Cov-2, yang saat ini menjadi salah satu isu di seluruh dunia. Riset ini bertujuan menganalisis study molekuler pada implementasi penggunaan aplikasi PyMOL untuk pemurnian dan isolasi selektif protein spike varian 6ZGH virus Sars-Cov-2.

2. Metode

Sebelum melakukan riset kita harus menyiapkan alat dan bahan yang akan kita gunakan terlebih dahulu. Dalam riset ini, alat yang digunakan adalah laptop sebagai perangkat keras dengan spesifikasi Intel® Celeron® CPU N3350 @ 1.10GHz 1.10GHz, dengan Installed RAM 2,00 GB (1,83 GB usable). Untuk bahan yang digunakan yaitu aplikasi PyMOL dengan klasifikasi PyMOL™ 2.5.2-Incentive Product, Copyright© Schodinger, LLC dari situs protein data bank(PDB).

Pada pelaksanaan riset ini terdapat beberapa tahap yang akan dilakukan. Berikut diagram dari pelaksanaan riset ini dapat dilihat pada gambar 1.

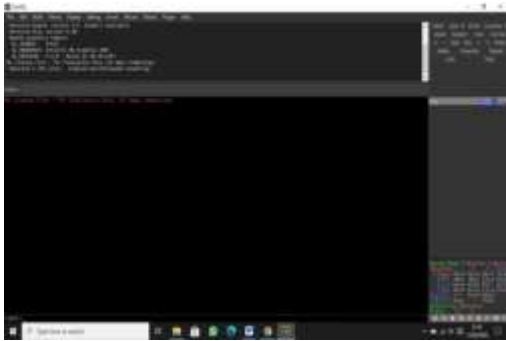


Gambar 1. Sistematika Kerja

Tahap pelaksanaan yang pertama yaitu tahap pemilihan struktur. Pada tahap ini, peneliti dapat memilih struktur protein spike yang akan dilakukan pemurnian dan isolasi. Tahap selanjutnya yaitu, tahap isolasi sebagian. Ditahap ini, protein spike yang telah dipilih akan dilakukan isolasi terlebih dahulu. Selanjutnya yaitu tahap pemurnian. Pada tahap pemurnian, dilakukan dengan cara meremove water, kemudian klik preset, lalu ligand site dan terakhir cartoon. Maka yang muncul adalah struktur yang sudah hampir murni. Selanjutnya tahap hasil, setelah pemurnian, kita menghapus angka-angka yang tidak diperlukan di atas struktur, maka protein spike yang telah dipilih sudah berhasil dimurnikan dan diisolasi.

3. Hasil dan Pembahasan

Riset ini dilakukan dalam beberapa tahapan yaitu menyiapkan alat dan bahan, lalu pemilihan struktur protein spike, kemudian isolasi sebagian protein target, kemudian pemurnian baru didapat hasil protein spike yang telah murni. Berdasarkan hasil riset yang telah dilakukan, bahwa aplikasi yang digunakan pada riset ini yaitu PyMOL. Dimana PyMOL digunakan untuk pemurnian dan isolasi spike protein. Tampilan aplikasi PyMOL yang berhasil diinstal dapat dilihat pada gambar 2. Kemudian untuk spike protein dengan dapat di download terlebih dahulu dengan mengakses situs <https://www.rscb.org/structure/6ZGH>.



Gambar 2a. Tampilan awal PyMOL



Gambar 2b. Akses Protein Spike 6ZGH

Gambar 2. Spike Protein dalam Aplikasi PyMol

RSCB PDB adalah web online untuk memilih dan mendownload varian protein target, yaitu varian 6ZGH. Ini adalah tampilan dari protein spike yang akan dikaji isolasi sebagian dan pemurniannya dapat dilihat pada gambar 3. Setelah varian dipilih, selanjutnya download spike protein dalam bentuk format cif.

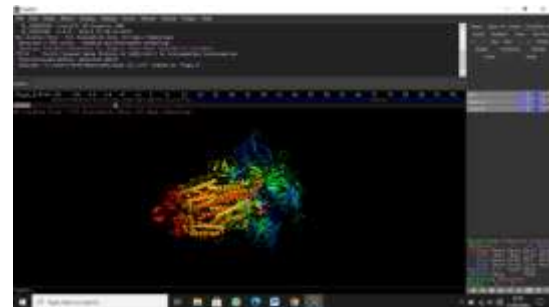


Gambar 3. Visual Varian Protein Spike 6ZGH

Langkah selanjutnya yaitu pemisahan air dan pengotor lainnya pada protein spike. Langkah ini dilakukan dengan mengklik A(action), pilih preset>>ligan sites>>cartoon. Bagian data yang tidak memiliki nilai, maka data tersebut harus dihapus. Caranya data tersebut di blok dan diklik kanan kemudian pilih remove. Maka akan terjadi perubahan, terutama pada bagian warna pada protein spike varian 6ZGH. Visual awal spike protein berwarna hijau dan setelah dimurnikan berubah menjadi bermacam-macam warna.



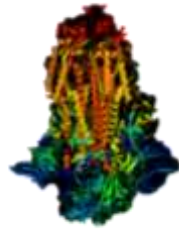
Gambar 4a. Struktur ligan



Gambar 4b. Struktur Ligan yang dimurnikan

Gambar 4. Spike Potein (Istimewa)

Hasil akhir dari riset ini berupa protein Sars-Cov-2 varian 6ZGH yang telah dimurnikan dari air, natif ligan dan pengotor lainnya. Visualisasi hasil riset dapat dilihat pada gambar 5.



Gambar 7. *Spike Protein 6ZGH Murni(Istimewa)*

4. Kesimpulan

Riset ini memiliki dua kajian yaitu, pemurnian dan isolasi selektif protein spike varian Sars-Cov-2. Dimana metode yang digunakan yaitu pemodelan molekuler dengan aplikasi PyMOL. Hasil dari riset ini yaitu visualisasi protein spike Virus Sars-Cov-2 varian 6ZGH dalam bentuk berupa struktur bebas air, struktur bebas natif ligan, dan pengotor lainnya pada protein target.