

ARTICLE

(Kajian Pemurnian dan Isolasi Selektif Protein Spike Virus SARS-CoV Varian 6XLU dengan Aplikasi PyMol)

Nabilla Syafina^a, Titik Sandra^b, Sesri Julfa Rahmi^c

^aTeknik Industri, Fakultas Teknik, Universitas BungHatta, Padang, Indonesia

^bMatematika, Fakultas Tarbiyah dan keguruan, Universitas Islam Negeri Imam Bonjol, Padang, Indonesia

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

Email: sesrijulfarahmi@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan mengkaji pemurnian dan isolasi selektif dengan aplikasi PyMol. Metode yang diterapkan adalah pemodelan komputasi dengan aplikasi PyMol versi 2.5.2 yang dikeluarkan oleh Schrodinger. Aspek kajian dalam riset ini adalah pemurnian dan isolasi selektif. Protein yang dipakai adalah varian spike virus Sars-Cov-2, yang disiapkan dari website <http://www.rscb.org>. Analisis komputasi menggunakan perangkat keras komputer dengan spesifikasi processor Intel(R) Celeron(R) N4120 CPU @ 1.10GHz 1.10GHz dan RAM 4.00 GB. Hasil yang didapatkan dari varian yang dimurnikan dan diisolasi adalah protein murni varian spike 6XLU Sars-Cov-2. Diperoleh protein varian 6XLU berbentuk remove water, ligan site dan cartoon. Pemurnian dan isolasi varian 6XLU berhasil memisahkan air dan pengotor lain pada protein target.

ARTICLE HISTORY

Submission: 05 April 2022

Revised: 22 Mei 2022

Accepted: 04 Juni 2022

Publised: 05 Juni 2022

Citation:

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

1. Pendahuluan

Studi komputasi adalah kunci utama riset Kajian Pemurnian dan Isolasi Selektif Protein Spike Virus SARS-CoV Varian 6XLU dengan Aplikasi PyMol. Studi komputasi merupakan kajian yang menggunakan komputer dan perhitungan dalam kimia. Komputasi juga menggambarkan suatu senyawa secara visual. Namun, implementasi pemodelan belum banyak dan belum optimal.

Berdasarkan hasil riset, studi komputasi menggunakan beberapa aplikasi diantaranya PyMol, HyperChem dan Avogadro. PyMol merupakan sebuah aplikasi yang digunakan dalam visualisasi molekul serta animasi 3D (Anonim, 2010). Hypercam merupakan aplikasi yang digunakan dalam perhitungan kimiawi. Dan masih banyak lagi aplikasi yang digunakan ilmuwan dewasa ini.

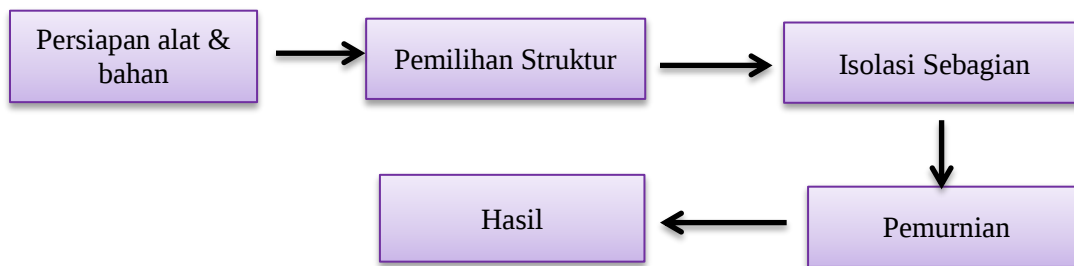
Dalam riset ini dikaji penggunaan aplikasi PyMol untuk melihat pemurnian dan isolasi spike protein. Kajian itu diterapkan pada salah satu varian virus Sars-Cov-2 yang saat ini menjadi isu

dunia. Riset ini bertujuan untuk mengkaji pemurnian dan isolasi selektif Protein Spike Virus SARS-CoV Varian 6XLU dengan Aplikasi PyMol.

2. Metode

Perangkat keras yang digunakan berupa komputer spesifikasi processor Intel(R) Celeron(R) N4120 CPU @ 1.10GHz 1.10GHz dengan RAM 4.00 GB sebagai sistem operasi. Sedangkan perangkat lunak berupa aplikasi PyMol dengan spesifikasi versi 2.5.2 dikeluarkan oleh Schrodinger. Bahan yang digunakan adalah spike protein virus Sars-Cov-2 varian 6XLU yang diunduh dari website <http://www.rscb.org> dalam format PDBx/mmCIF Format.

Riset ini dilakukan dengan tahapan-tahapan yang sistematis sebagaimana terlihat pada skema pada gambar 1.



Gambar 1. Skema Kerja

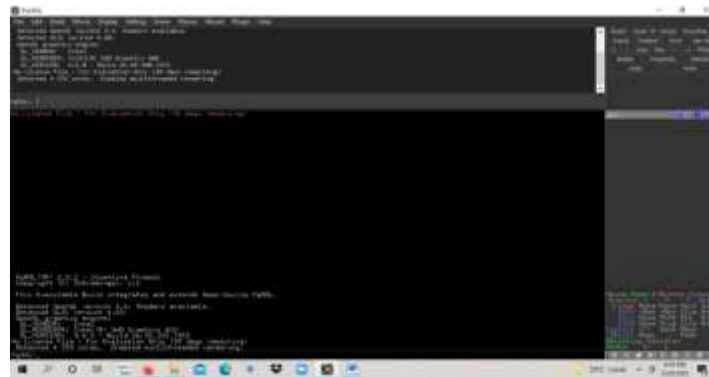
Aplikasi PyMol dapat diunduh dari google dan disesuaikan dengan perangkat keras yang digunakan. Kemudian aplikasi ini diinstal dengan mengikuti langkah-langkah penginstallan.

Struktur protein 6XLU didownload pada website <http://www.rscb.org> melalui google chrome. Struktur tersebut selanjutnya disterilkan menggunakan aplikasi PyMol dengan cara memasukkan struktur protein tersebut kedalam aplikasi dengan mengklik menu file lalu open dan klik struktur yang akan dimasukkan dalam PyMol, kemudian klik tombol “S” pada kanan bawah aplikasi.

Untuk memurnikan protein dari air, pilih bagian “A” pada bagian kanan aplikasi kemudian klik remove water. Sedangkan untuk memurnikan spike protein dari native ligan, maka pilih lagi bagian “A”, kemudian klik “preset” lalu klik “ligand sites” dan “cartoon”. Dengan ini, struktur protein 6XLU telah murni dari air dan native ligan yang menempel. Selanjutnya hasil pemurnian disimpan dengan cara klik “file” lalu klik “export molecule”, kemudian simpan file dengan nama “Spike Protein 6XLU murni” dan disimpan dalam format “PDBx/mmCIF” lalu klik “save”. Maka struktur protein 6XLU murni telah tersimpan.

5. Hasil dan Pembahasan

Aplikasi PyMol dapat dimanfaatkan untuk pemurnian dan isolasi selektif spike Sars-CoV-2. Sebelum itu, PyMol harus didownload dan diinstal agar dapat digunakan. PyMol yang telah terinstal, maka tampilannya akan seperti ini. Sebagaimana terlihat pada gambar 2.



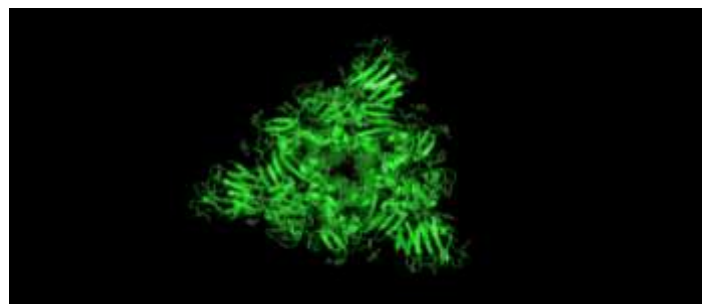
Gambar 2. Aplikasi PyMol Terinstal

Berdasarkan hasil visualisasi molekuler dengan aplikasi PyMol versi 2.5.2, varian 6XLU pada Spike Protein Sars-CoV-2 telah berhasil dimurnikan. Ditandai dengan tidak adanya zat pengotor, air dan native ligan pada senyawa tersebut.



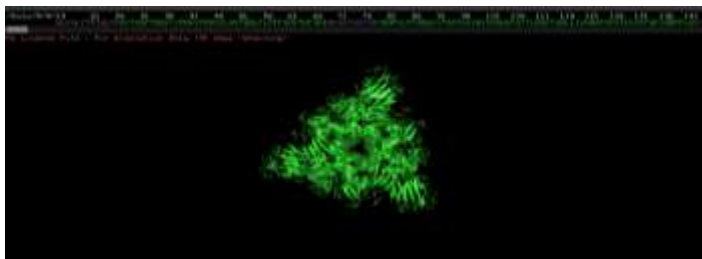
Gambar 3. Spike Protein 6XLU

Struktur protein 6XLU yang belum murni, masih mengandung air yang tampak berwarna merah dibagian ligan dan titik-titik merah pada struktur protein, sebagaimana terlihat pada gambar 4.



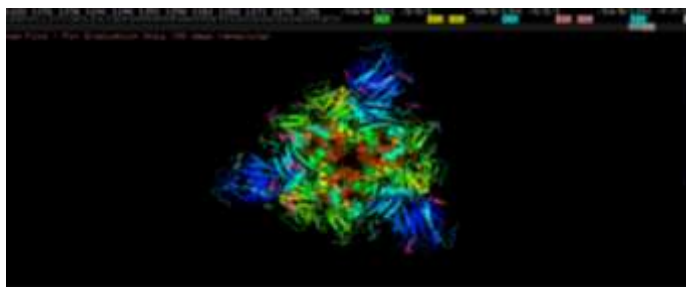
Gambar 4. Struktur Awal Protein Menggunakan PyMol

Air yang menempel pada protein tersebut dihilangkan dengan mengklik “*remove water*” sehingga titik-titik merah pada struktur protein menghilang. Sebagaimana yang terlihat pada gambar 5.

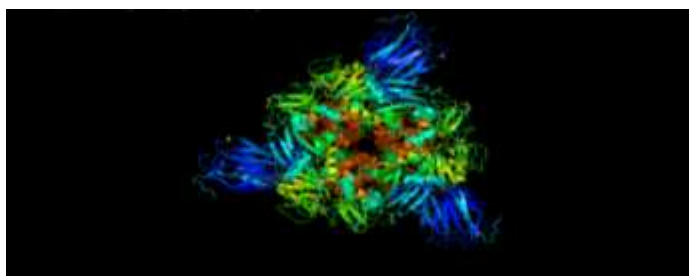


Gambar 5. Spike Protein 6XLU Setelah Remove Water

Selanjutnya klik A lagi, lalu pilih preset >>ligan sites >> cartoon, untuk menghilangkan native ligan dan pengotor lainnya. Hasil pemurnian dan isolasi ditandai dengan warna dan bentuk yang berbeda pada tampilan awal dan akhir.



Gambar 6a. Menghilangkan Native Ligan



Gambar 6b. Spike Protein Murni 6XLU

6. Kesimpulan

Riset ini berhasil mendapatkan protein varian 6XLU yang telah murni dari air, native ligan dan pengotor lainnya. Protein murni ini ditandai dengan hilangnya titik-titik merah pada struktur molekul dan sempurnanya warna serta bentuk dari protein target. Riset lanjutan dapat dilakukan pada tahapan interaksi molekuler secara dinamis.

Ucapan Terimakasih