

ARTICLE

Pengujian *Molecular Docking* Senyawa Aktif 2- undercanone dari Paperomia Pellucida dengan Protease 7K0E menggunakan PYMOL dan PYREX

Ibnu Suhardito¹, Ratih Afriyani²,

¹Department of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Sciences, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

²Department of Chemical Engineering of Vegetable Materials, ATI Polytechnic Padang

email: afriyaniratih@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan untuk menganalisis pemurnian dan studi docking molekuler bahan aktif 2 Undercanone dari Daun Sirih Merah (Paperomia Pellucida) menggunakan Protoase 7K0E. Metode yang digunakan adalah aplikasi Pymol versi 1.7.4.5 Win32.msi dan PyRx versi 0.8 (python.exe) 32-bit. Penelitian ini dilakukan dengan mengamati molekul 3D dan ligan yang digunakan. Perangkat yang digunakan adalah prosesor intel Core TM i7-2670QM 2.2GHz, RAM 8 GB. Screening molekul aktif menggunakan situs <https://phytochem.nal.usda.gov>. Senyawa aktif didapatkan dari situs pubchem www.pubchem.com Hasil *docking* didapatkan nilai *binding affinity* untuk masing-masing RMSD (Lower Bond) 0 ; 2,922 ; 4,322; 3,841; 12,231; 12,502; 12,344; 12,3; 3.133 dan RMSD (Upper Bond) 0 ; 5,046; 6,912; 5,097; 14,22; 14,046; 13,9; 13,701; 3,792 yaitu -4,9 ; -4,7; -4,4; -4,3; -4,3; -4,3; -4,2; -4,2; -4,2.

ARTICLE HISTORY

Submission: 10 Mei 2022

Recevid: 31 Mei 2022

Accepted: 04 Juni 2022

Published: 04 Juni 2022

Citation:

Keywords: PyMol, PyRx, ; ,
molecular docking, 2-undercanone

1. Pendahuluan

Paperomia Pellucida banyak ditemui di Indonesia sebagai tanaman obat-obatan. Tanaman ini termasuk dalam famili Piperaceae dengan penampakan daun yang berwarna merah keperakkan dan mengkilap saat kena cahaya. Sirih merah memiliki sifat anti jamur yang merupakan komponen yang dibutuhkan untuk memperhambat bakteri patogen. Sirih merah merupakan salah satu tanaman herbal yang digunakan dalam campuran berbagai pengobatan tradisional. Di Indonesia daun sirih merah telah digunakan secara turun temurun untuk mengobati berbagai penyakit. Namun demikian, tanaman Sirih merah ini belum sepenuhnya di manfaatkan oleh masyarakat untuk berbagai pengobatan

sirih merah mengandung flavonoid, senyawa alkaloid polifenolat, tanin dan minyak atsiri. Senyawa senyawa di atas yang diketahui memiliki sifat antibakteri. Flavonoid berfungsi sebagai antibakteri dengan cara membentuk senyawa kompleks terhadap protein ekstraseluler yang mengganggu integritas membran sel bakteri. Menurut Dwidjoseputro, flavonoid merupakan senyawa fenol senyawa fenol dapat bersifat koagulator protein.

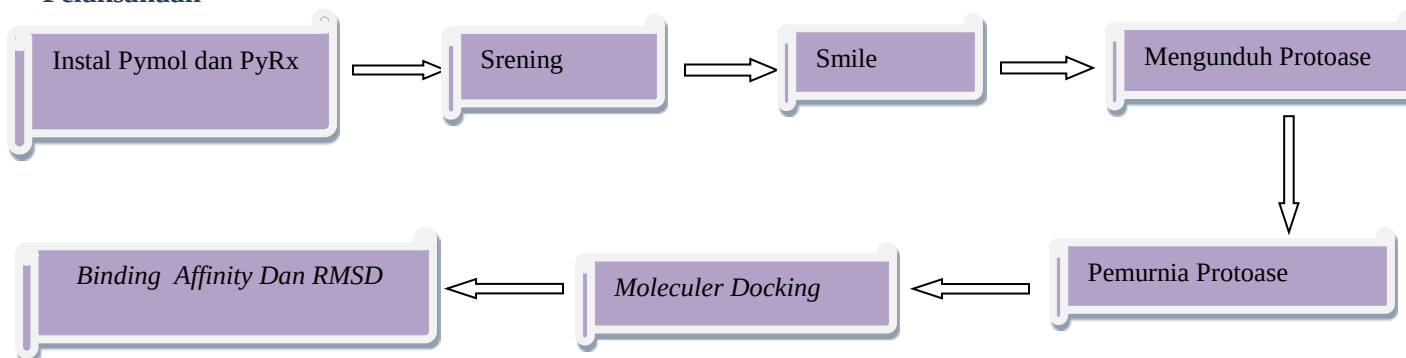
Pada observasi ini, peneliti mengkaji varian 7K0E. Uji pemurnian selektif menggunakan metode docking molekuler untuk menghasilkan afinitas ikatan dan nilai RMSD. Tujuan dari percobaan ini adalah menggunakan PyMOL dan PyRx untuk mengamati interaksi bahan aktif tiamin pada tanaman Belimbing Wuluh (*Averrhoa Blimbi*) dengan protease SarsCov2 varian 7K0E.

2. Metode

Persiapan

Screening molekul aktif menggunakan situs www.phytochem.nal.usda.gov. Protease 7k0e protein SARS-COV-2 diperoleh dari PDB (<https://www.rcsb.org>). Struktur 3D dan SMILE molekul diperoleh dari simulasi permodelan pubchem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>). Uji komputasi dilakukan menggunakan computer prosesor Intel (R) Celeron (R) N4000 CPU@ 1.10GHz (2 CPUs), 1.1GHz. Perangkat lunak yang digunakan EduPyMOL versi 7.4.5-Win32 msi dan PyRx versi PyRx version 0.8 (python.exe)

Pelaksanaan



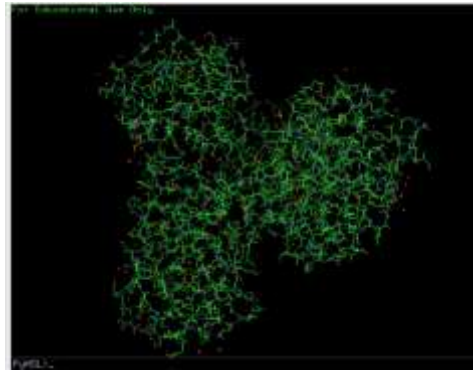
Gambar 1. Skema (Courtesy / Ratih Afriyani)

Evaluasi

Protein dapat disterilkan menggunakan aplikasi PyMol. Afinitas pengikatan data dan RMSD diperoleh dari PyRx. Afinitas pengikatan dihubungkan untuk menentukan jarak antara molekul aktif dan protease

3. Hasil dan Pembahasan

Pemurnian dilakukan dengan menggunakan software Pymol, pada kesempatan kali ini kami menggunakan protease sarscov_2 yaitu 7K0E. Pemurnian dilakukan dengan menggunakan



protease dari sarscov_2. Protease ini dapat diunduh pada situs pdb. Pemurnian dilakukan bertujuan untuk mengurangi kesalahan dalam melakukan molecular docking. Karena ada beberapa protease yang tidak cocok dengan senyawa aktif yang dipakai, atau bahkan kemungkinan bisa terjadi eror atau proteasenya tidak steril karena kurang teliti dalam melakukan pemurnian (human eror).

Gambar 2. Protease sebelum disterilkan

Protease yang belum dimurnikan ini biasanya mengandung pengotor berupa air yang ditandai dengan adanya bercak-bercak merah dan native ligand yang berupa DMS. Untuk menghilangkan pengotor berupa air dapat dilakukan dengan cara menekan Remove Water pada menu action. Sedangkan untuk menghilangkan pengotor berupa DMS, dapat dilihat pada sequen yang tersedia, jika ada DMS maka klik kanan pada DMS lalu pilih remove, begitu seterusnya hingga tidak ada lagi DMS yang tersisa. Karena pada protease yang kami gunakan tidak terdapat pengotor berupa DMS sehingga kami langsung masuk ke tahap penyimpanan molekul yang telah steril. Karena ada beberapa protease yang hanya memiliki pengotor berupa air

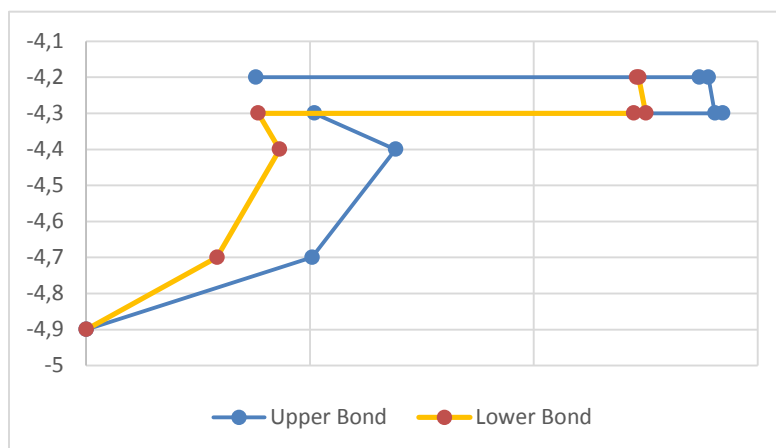


Gambar 3. Protease yang telah disterilkan

Tabel 1. Hasil molecular docking senyawa aktif 2-undercanone dengan Protease 7K0E

Ligand	Binding Affinity	rmsd/ub	rmsd/lb
protein_7k0e_8163_uff_E=35.97	-4,9	0	0
protein_7k0e_8163_uff_E=35.97	-4,7	5,046	2,922
protein_7k0e_8163_uff_E=35.97	-4,4	6,912	4,322
protein_7k0e_8163_uff_E=35.97	-4,3	5,097	3,841
protein_7k0e_8163_uff_E=35.97	-4,3	14,22	12,231
protein_7k0e_8163_uff_E=35.97	-4,3	14,046	12,502
protein_7k0e_8163_uff_E=35.97	-4,2	13,9	12,344
Pro tein_7k0e_8163_uff_E=35.97	-4,2	13,701	12,3
protein_7k0e_8163_uff_E=35.97	-4,2	3,792	3.113

Berdasarkan data yang diperoleh dari tabel di atas, nilai afinitas pengikatan berbanding lurus dengan RMSD. Semakin tinggi nilai binding affinity maka semakin tinggi nilai RMSD. Seperti yang ditunjukkan pada gambar di bawah ini:



Gambar 4. Grafik RMSD dan Binding Affinity (Courtesy/Ratih Afriyani)

4. Kesimpulan

Studi menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRX telah berhasil mendapatkan nilai RMSD dan *afinitas* pengikatan. Berdasarkan hasil molecular docking, dapat disimpulkan bahwa protease yang digunakan kompatibel dengan bahan aktif 2 undercanone. Hasil dari docking diperoleh

nilai afinitas pengikatan (kcal/mol) masing-masing RMSD (pengikatan bawah). 0; 2.922; 4.322; 3.841; 12.231; 12.502; 12.344; 12.3; 3.133 dan RMSD (batas atas) 0; 5.046; 6.912; 5.097; 14.22; 14.046; 13.9; 13.701; 3.792 atau 4.9; 4.7; 4.4; 4.3; 4.3 ; 4.3; 4.2; 4.2; 4.2.Selanjutnya diperlukan penelitian yang lebih rinci.