

ARTICLE

Studi *In Silico* Avicularin dari Tanaman *Psidium guajava* dengan Protease SARS-CoV-2 Omicron Varian 7ACT

Rayhand¹, Abdul Hamid^{2*}

¹Department of Medicine, Faculty of Medicine, Andalas University, Padang, Indonesia.

²Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Padang State University, Padang, Indonesia

*Corresponding email: hamidcyber19@gmail.com

ABSTRACT

Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis interaksi senyawa aktif Avicularin dari tanaman *Psidium guajava* dengan protease Sars-CoV-2 varian 7ACT. Metode yang digunakan yaitu EduPyMOL-Versi1.7.4.5-Win32.msi dan PyRx version 0.8 (python.exe) 32 Bit. Riset ini dilakukan dengan mengeksplorasi struktur 3D molekul dan interaksi ligan-protein yang digunakan. Perangkat keras laptop HP dengan spesifikasi AMD Ryzen 5 4500U with Radeon Graphics 2.38 GHz, Ram 8 GB, Windows 11 Home Single Language 64-bit sebagai sistem operasi. Protease 7ACT diperoleh dari <https://www.rcsb.org/> dan Screening molekul aktif menggunakan situs <https://phytochem.nal.usda.gov/> serta senyawa aktif nya didapatkan dari situs (www.pubchem.com). Hasil dari eksperimen ini adalah senyawa aktif dengan SMILE C1=CC(=C(C=C1C2=C(C(=O)C3=C(C=C(C=C3O2)O)O)OC4C(C(C(O4)CO)O)O)O. Protease 7ACT berhasil dimurnikan dengan PyMOL. Hasil molecular docking didapatkan nilai *binding affinity* (kkal/mol) yaitu -5,5; -5,4; -5,4; -5,2; -5,0; -4,8; -4,8; -4,8; -4,8; -4,7 dengan RMSD (*upper bond*) 0; 8,288; 6,654; 9,598; 5,312; 6,154; 8,277; 6,521; 7,023 dan RMSD (*lower bond*) 0; 3,389; 3,49; 5,198; 1,775; 3,073; 3,605; 3,146; 2,003.

ARTICLE HISTORY

Submission: 4 Mei 2022

Received: 21 Mei 2022

Accepted: 3 Juni 2022

Citation:

Keywords: PyMOL, PyRx, Avicularin, Varian 7ACT, Sars-Cov-2

1. Introduction

Jambu biji (*Psidium guajava*) merupakan tanaman yang sangat bermanfaat bagi kesehatan manusia. Tanaman jambu biji sudah sering dimanfaatkan masyarakat, salah satunya untuk mengobati penyakit seperti diabetes dan diare. Jambu biji memiliki senyawa aktif seperti amritoside, aromadendren, avicularin yang berfungsi menyerap racun dan menggumpalkan protein, anti mutagenik dan analgesik. Namun demikian, investigasi senyawa avicularin dalam jambu biji masih belum optimal, terutama dibidang kajian molekuler.

Pada riset ini diperlukan studi komputasi. Studi komputasi dapat menjelaskan bentuk dan struktur molekul protein. Selain itu juga dapat menunjukkan visualisasi 3D struktur molekul yang mana hal tersebut tidak dapat dilakukan melalui teori saja. Namun, kimia komputasi ini belum diterapkan secara

maksimal, oleh sebab itu pada riset ini kimia komputasi digunakan untuk meninjau interaksi molekuler menggunakan *software* PyMol dan PyRx.

Berdasarkan penelitian ini, aplikasi PyMOL digunakan untuk memberikan visualisasi struktur 3D molekul yang jelas dan detail. Protease 7ACT dimurnikan dengan PyMOL dari pengotor air dan *native ligand* sehingga diperoleh protease yang steril.

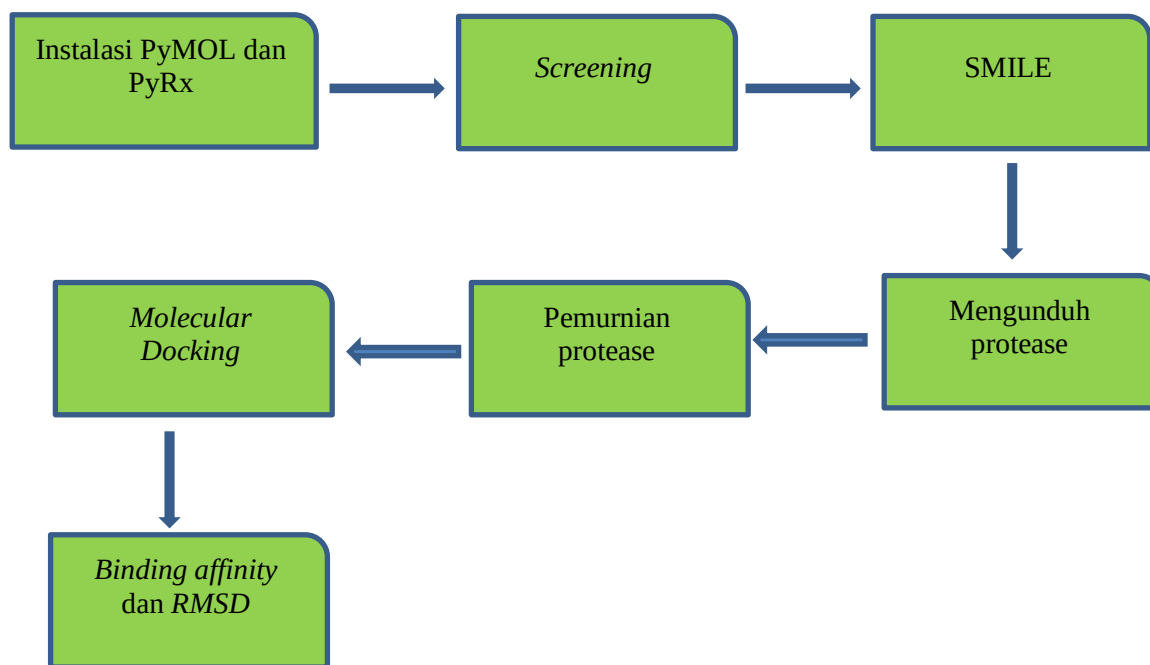
Dalam riset ini, dilakukan suatu analisis hubungan antara protease Sars CoV-2 varian 7ACT dengan senyawa aktif menggunakan PyMOL dan PyRx dengan metode *molecular docking* sehingga diperoleh data RMSD dan *binding affinity*. Tujuan riset ini adalah untuk mengkaji interaksi hubungan molekul aktif avicularin dengan protease 7ACT menggunakan aplikasi PyMOL dan *molecular docking* dengan aplikasi PyRex.

2. Experimental

2.1 Persiapan

Screening senyawa aktif di ambil dari situs <https://phytochem.nal.usda.gov/>. Protease 7ACT diperoleh dari situs (<https://www.rscb.org>) dengan format PDB dan SMILE molekul aktif diperoleh dari www.pubchem.com dengan format sdf. Perangkat keras yang digunakan berspesifikasi AMD Ryzen 5 4500U with Radeon Graphics 2.38 GHz. Uji komputasi menggunakan EduPyMOL-Versi1.7.4.5-Win32.msi untuk pemurnian protease 7ACT dan molecular docking menggunakan PyRx version 0.8 (python.exe) 32 Bit.

2.2 Pelaksanaan



Gambar 1. Skema (Courtesy/Abdul Hamid)

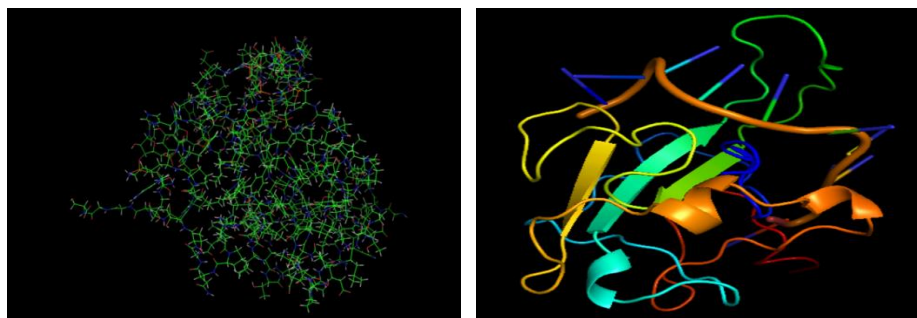
Interpretasi dari gambar 1 menunjukkan prosedur pelaksanaan penelitian yaitu instalasi aplikasi PyMOL dan PyRx, *screening* molekul aktif yang di ambil dari situs <https://phytochem.nal.usda.gov/>. SMILE dari molekul aktif didapatkan dari situs www.pubchem.com, Protease 7ACT yang akan dijadikan bahan di unduh di situs <https://www.rcsb.org/> kemudian dimurnikan dari pengotor air dan *native ligand* menggunakan PyMOL. *Molecular docking* dilakukan pada senyawa aktif *avicularin* dengan protease 7ACT sehingga diperoleh nilai *binding affinity* dan nilai RMSD (*upper bond* dan *lower bond*).

2.3 Evaluasi

Hasil visual gambar dari protease 7ACT yang telah steril diperoleh dari PyMOL. Data RMSD dan *binding affinity* diperoleh dari aplikasi PyRx, nilai RMSD dan *binding affinity* saling berhubungan, tarikan antara molekul aktif dan protease ditentukan oleh nilai dari RMSD dan *binding affinity*.

3. Results and discussion

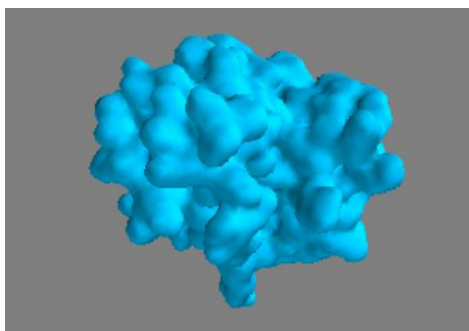
3.1 Results



Gambar 2 a). Visualisasi model 3D protease 7ACT belum steril. b) Visualisasi 3D Protease yang telah disterilkan. (Courtesy/Abdul Hamid)

Interpretasi dari gambar 2a menunjukkan visualisasi protease 7ACT yang belum steril. Protease 7ACT disterilkan dengan aplikasi EduPyMOL-Versi1.7.4.5-Win32.msi untuk menghilangkan pengotor air dan *native ligand*. Protease yang sudah steril dapat digunakan untuk *molecular docking* menggunakan PyRx.

Visualisasi gambar 2b menunjukkan protease 7ACT yang telah steril. Protease yang telah steril ini akan digunakan untuk *molecular docking* senyawa aktif *avicularin*. *Molecular docking* adalah tahap untuk menentukan hubungan senyawa aktif *avicularin* dengan protease 7ACT yang digunakan. *Molecular docking* bertujuan meniru peristiwa interaksi suatu molekul ligan dengan protein yang menjadi targetnya pada uji *in-vitro*.

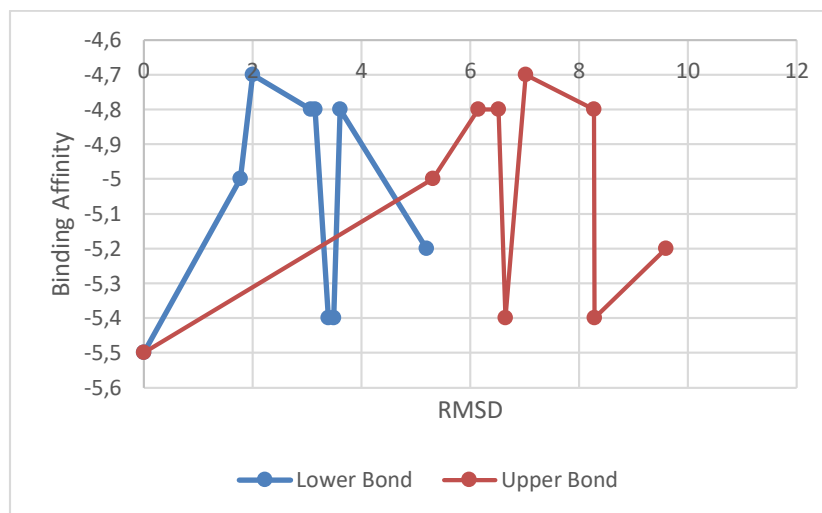


Gambar 3. Permukaan molekul protease 7ACT yang telah steril.
(Courtesy/Abdul Hamid)

Visualisasi gambar 3 menunjukkan permukaan molekul protease 7ACT yang telah steril yang akan digunakan untuk *molecular docking* senyawa aktif sehingga diperoleh data RMSD dan *binding affinity*.

Tabel 1. Hasil *Molecular docking* senyawa aktif *avicularin* dengan protease 7ACT.

Ligand	Binding Affinity	rmsd/ub	rmsd/lb
Protease_steril_7act_5490064_uff_E=670.36	- 5,5	0,0	0,0
Protease_steril_7act_5490064_uff_E=670.36	- 5,4	8,288	3,389
Protease_steril_7act_5490064_uff_E=670.36	- 5,4	6,654	3,49
Protease_steril_7act_5490064_uff_E=670.36	- 5,2	9,598	5,198
Protease_steril_7act_5490064_uff_E=670.36	- 5,0	5,312	1,775
Protease_steril_7act_5490064_uff_E=670.36	- 4,8	6,154	3,073
Protease_steril_7act_5490064_uff_E=670.36	- 4,8	8,277	3,605
Protease_steril_7act_5490064_uff_E=670.36	- 4,8	6,521	3,146
Protease_steril_7act_5490064_uff_E=670.36	- 4,7	7,023	2,003



Gambar 4. Hubungan nilai RMSD dengan *binding affinity*.
(Courtesy/Abdul Hamid)

Interpretasi gambar 4 dan tabel 1 menunjukkan hubungan nilai RMSD dengan *binding affinity*. Jika nilai RMSD semakin besar maka jarak antara protease dengan molekul aktif semakin jauh dan tarikan antara kedua molekul akan semakin berkurang.

4. Conclusion

Penelitian ini berhasil dilakukan yang dibuktikan dengan protease yang steril dari pengotor menggunakan PyMOL. *Molecular Docking* molekul aktif *avicularin* dengan protease 7ACT diperoleh nilai RMSD (*upper bond*) 0; 8,288; 6,654; 9,598; 5,312; 6,154; 8,277; 6,521; 7,023 dan RMSD (*lower bond*) 0; 3,389; 3,49; 5,198; 1,775; 3,073; 3,605; 3,146; 2,003 serta nilai *binding affinity* (kkal/mol) yaitu -5,5; -5,4; -5,4; -5,2; -5,0; -4,8; -4,8; -4,8; -4,8; -4,7. Penelitian lanjutan diperlukan dilaboratorium untuk memvalidasi hasil.