

1. Introduction

β -carotene adalah senyawa aktif dari tumbuhan mahkota dewa (*phaleria macrocarpa*) yang tergolong kelompok karatonoid. Studi *in silico* bertujuan mengetahui perhitungan secara komputasi senyawa aktif β -carotene yang pada dasarnya penting untuk dibahas guna memperluas cakrawala serta meningkatkan mutu pendidikan dunia. Namun sampai saat ini belum banyak studi komputasi terkait analisa senyawa aktif β -carotene menggunakan *software* PyMOL dan PyRX dengan berbagai alasan salah satunya keterbatasan media kerja dan ilmu pengetahuan yang tidak memadai.

Pada riset ini sangat memerlukan studi komputasi. Studi komputasi dapat menjelaskan bentuk dan struktur molekul protein yang mana hal tersebut tidak dapat dilakukan melalui teori saja. Namun, kimia komputasi ini belum terlalu optimal untuk digunakan pada suatu penelitian atau pembelajaran.

Berdasarkan riset ini, *software* PyMOL digunakan untuk menunjukkan tampilan dari struktur yang hendak kita teliti dengan jelas. Aplikasi ini merupakan program visualisasi molekul yang memberikan kualitas gambar 3D yang baik dari molekul yang kita teliti. Pada riset ini dilakukan pemurnian Protease SARS-CoV-2 Omicron varian 7K0E.

Dalam riset ini dilakukan analisis hubungan protease dengan senyawa aktif menggunakan PyRx dengan metode *Molecular Docking* sehingga menghasilkan nilai RMSD dan *Binding Affinity*. Tujuan riset ini adalah untuk menganalisis interaksi senyawa aktif Beta Carotene dari tanaman buah mahkota dewa (*Phaleria Macrocarpa*) dengan protease Sars-CoV-2 varian 7K0E menggunakan aplikasi PyMOL dan PyRx.

2. Methodologi

2.1 persiapan

Senyawa protease sars cov 2 varian 7K0E yang didapatkan pada protein databank (<https://www.rcsb.org/>) ditampilkan kemudian disterilkan terlebih dahulu menggunakan *software* PyMOL dengan kualitas gambar 3D. Setelah didapat senyawa yang steril, struktur senyawa aktif yang berasal dari buah mahkota dewa (*phaleria macrocarpa*) diproses dan diperoleh SMILES pada (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) untuk kemudian dimasukkan dan diproses pada *software* PyRX guna menghubungkan protease sars cov 2 varian 7K0E dengan senyawa aktif β -carotene dengan Perangkat keras yang digunakan yaitu laptop dengan spesifikasi Asus E203MAH dengan spesifikasi antara lain Intel N4000, RAM 4 GB, HDD 500 GB. Layar HD LED 11.6 inchi, dan Windows 10.

2.2 Pelaksanaan

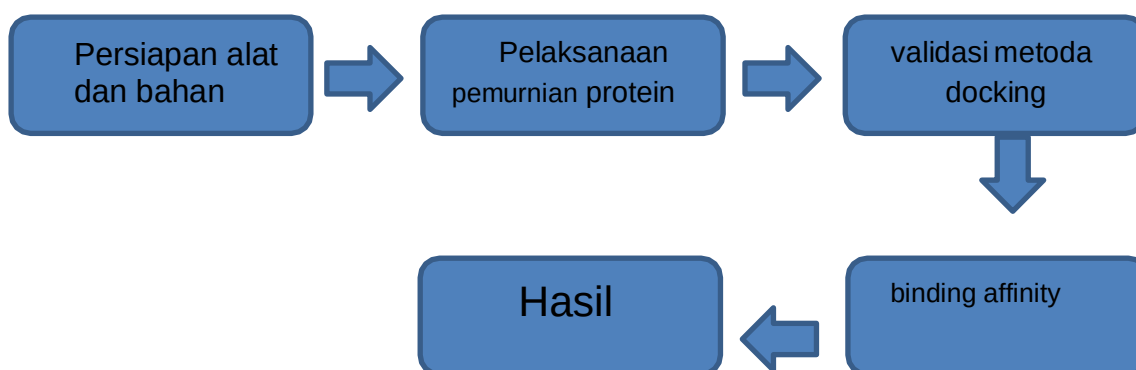
Pemurnian protein

Perangkat lunak yang digunakan yaitu PyMOL, dimana pada proses ini yaitu melakukan pemurnian pada protein 7K0E dari molekul air serta zat pengotor lainnya. Ligan yang telah steril nantinya akan digunakan sebagai berkas siap pakai menggunakan AutoDock dan openbabel dalam PyRx.

2.3 Evaluasi

Validasi metode docking

Tujuan dari docking ligan yang telah steril yaitu untuk memperoleh konfirmasi 3D ligan natif terhadap reseptor dengan melihat koordinat pusat masa struktur serta besaran gridbox dari vina atau AutoDock konfirmasi hasil docking disejajarkan dengan konfirmasi ligan yang telah steril sebelumnya yang dinyatakan dalam nilai root mean square deviation (RMSD)



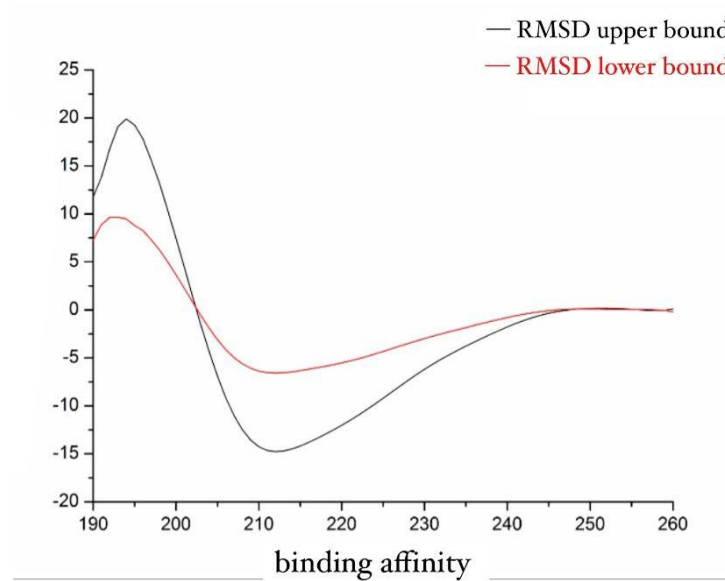
3. Results and discussion

Makromolekul protein target yaitu Protease SARS-CoV-2 Omicron Variant S Varian 7K0E. Ligan dan protein berhasil dipreparasi dan didapatkan protein tanpa ligan dan ligannya (natif) dengan menggunakan aplikasi Pymol. Kelebihan ini yang berhasil digunakan untuk melakukan docking molekular dengan program PyRx sebelumnya (Luthfiyah & Santoso, 2014)

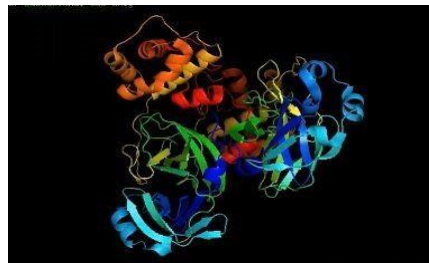
Hasil yang didapatkan dari pemurnian dan molecular docking menggunakan software PyMOL adalah protease bebas air dan pengotor lainnya yang akan di proses ke dalam software PyRX lalu diproses dan digabungkan dengan senyawa aktif β -carotene dan didapatkan ligan yang telah dipisahkan.

Ligand	Binding affinity	Mode	RMSD Lower bond	RMSD Upper bound
6xch_protease_ Seril_2719_uff= 262.55	-5.8	0	7.0	12.0
6xch_protease_ Seril_2719_uff= 262.55	-5.5	1	10.745	20.62
6xch_protease_ Seril_2719_uff= 262.55	-5.4	2	-5.061	- 15.43

Tabel 1 nilai Binding Affinity

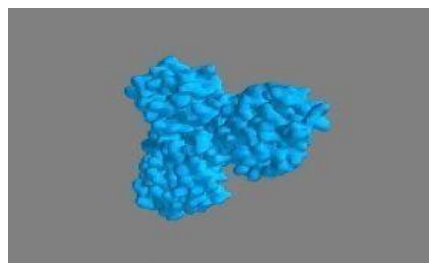


Grafik 1 nilai Binding Affinity



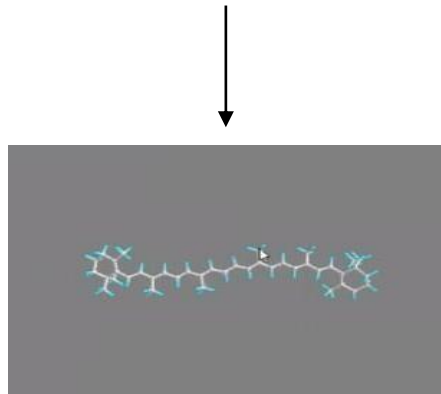
Gambar 1 Hasil preparasi protein 7K0E Tampilan 3D berbentuk Cartoon
(istimewa, ilmy chindikia)

Ini merupakan protease yang telah dimurnikan dan bebas dari air maupun pengotor lainnya diproses pada software PyMOL.



Gambar 2 Molekul Surface (istimewa, ilmy chindikia)

Merupakan penggabungan protease steril yang telah dimurnikan dari pengotor dan telah digabungkan dengan senyawa aktif β -carotene diproses pada software PyRX.



Gambar 5 Ligan yang telah dipisahkan (istimewa, ilmy chindikia)
Merupakan ligan yang telah dipisahkan dan telah diproses pada software PyRX, ini merupakan hasil akhir sebelum didapatkannya binding affinity

4. Conclusion

Pada pemurnian dan molecular docking dengan senyawa aktif β -carotene dengan Protease SARS-CoV-2 Omicron Varian 7K0E menggunakan aplikasi PyMol dan PyRx telah berhasil dilakukan yaitu menghilangkan pengotor air dan pengotor lainnya. Dengan SMILES

CC1=C(C(CCC1)(C)C)/C=C/C(=C/C=C/C(=C/C=C/C=C(/C=C/C=C(/C=C/C2=C(CCCC2(C)C)C)\C)\C)/C)/C den protease SARS-coV 2 varian 7K0E.

Dengan demikian dari hasil uji in silico dengan perhitungan secara komputasi dari pengujian senyawa aktif β -carotene. Dengan hasil protein steril dan nilai Binding Affinity yaitu -5.8, -5.5, -5.4 dengan RMSD Lower Bond 7.0, 10.745, -5,.061 dan RMSD upper bound 12.0, 20.62, -15.43.