

ARTICLE

Tinjauan Interaksi Molekular *Casbene* dari *Ricinus Communis* dengan Protease Sars-CoV-2 Omicron Varian 7KOE

Laora Cahyani Bawemewi¹, Nicky Leonardus Simbolon², Jihan Fadhilah Zahran^{3*}

¹Department of Biology, Faculty of Technobiology Universitas Atma Jaya Yogyakarta, Indonesia

²Department of Information Systems, Faculty of Engineering, Universitas Widyatama Bandung, Indonesia.

³Department of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Sciences, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia.

*Corresponding email: jihanfadhilahzahrn@gmail.com

ABSTRACT

Riset ini bertujuan untuk mengkaji interaksi molekular *Casbene* dari *Ricinus Communis* dengan Protease Sars-CoV-2 Omicron Varian 7KOE. Metode yang dipakai adalah perhitungan secara komputasi dengan software PyMOL versi 1.7.4-5 Win32.msi dan PyRx Version 0.8 (python.exe) 32 Bit. Kajian dilakukan dengan mengobservasi konformasi 3D pada molekul dan *ligand* yang digunakan. Perangkat yang digunakan adalah Celeron (R) CPU N2840 2.16GHz, RAM 2 GB, Windows 7. System type 32-bit. *Screening* molekul diambil dari situs [dr.ducke \(https://phytochem.nal.usda.gov/\)](https://phytochem.nal.usda.gov/), dan www.pdb.org dan situs Pubchem (www.pubchem.com). Perangkat lunak yang digunakan adalah PyRx (Vina dan AutoDock) dan PyMOL. Dalam eksperimen ini diperoleh molekul aktif dengan SMILES CC1=CCCC(=CC2C(C2(C)C)CCC(=CCC1)C)C. Hasil yang didapatkan nilai Binding Afinity (kka/mol) yaitu 3,31; 4,676; 5,022; 5,269; 5,484; 5,829; 6,102; 16,971 dengan RMSD *upper bound* 0 dan 1,405; 1,449; 1,943; 1,95; 2,039; 2,072; 2,125; 15,627 dengan RMSD *lower bound* 0.

ARTICLE HISTORY

Submission: 5 Februari 2022

Recevid: 4 April 2022

Accepted: 4 Juni 2022

Published : 5 Juni 2022

Citation:

Keywords:

PyMOL, PyRx, *Casbene*, *Ricinus Communis*, Sars-CoV-2

1. Introduction

Tanaman Jarak (*Ricinus Communis*) memiliki banyak manfaat. Sebelum dikenal sebagai alternatif sumber energi tanaman ini digunakan sebagai obat tradisional yaitu antibakteri, antiinflamasi, meredakan bengkak, obat gigi berlubang dan meredakan gatal-gatal. Senyawa aktif yang terkandung dalam *Ricinus Communis* salah satunya adalah *casbene*. Namun demikian, riset pada tanaman ini masih terbatas.

Berdasarkan riset ini *software* PyMOL digunakan untuk menunjukkan tampilan dari struktur yang hendak diteliti dengan jelas. Aplikasi ini merupakan program visualisasi molekul yang memberikan kualitas gambar 3D baik dari molekul yang diteliti. Pada riset ini dilakukan pemurnian Protease Sars-Cov-2 Omicron varian 7kOe.

Dalam riset ini dilakukan analisis hubungan protease dengan senyawa aktif menggunakan PyRx dengan metode *Molecular Docking* sehingga didapatkan nilai *Binding Afinity* dan RMSD. Tujuan dari riset ini adalah untuk mengkaji interaksi molekular *Casbene* dari *Ricinus Communis* dengan Protease Sars-CoV-2 Omicron Varian 7kOe menggunakan PyMOL dan PyRx.

2. Metode

2.1 Persiapan

Senyawa aktif yang digunakan diperoleh dari Dr Ducke (www.phytochem.com) lalu Smiles diambil dari PubChem (www.pubchem.com) . Uji riset dilakukan dengan menggunakan Celeron (R) CPU N2840 2.16GHz, RAM 2 GB, Windows 7. System type 32-bit, Perangkat lunak yang digunakan adalah PyRx (Vina dan AutoDock) dan PyMOL

2.2 Pelaksanaan



Gambar 1. Skema (Courtesy/Jihan Fadhilah Zahran)

Pelaksanaan riset dimulai dengan instalasi aplikasi PyMOL dan PyRx, selanjutnya *screening* molekul aktif menggunakan situs Dr.Ducke. Setelah itu dilakukan pencarian smiles senyawa aktif menggunakan situs Pubchem. Kemudian dilakukan pemurnian molekul dengan aplikasi PyMOL, setelah dimurnikan dilakukan *molecular docking* dengan aplikasi PyRx sehingga diperoleh *binding afinity* dan RMSD.

2.3 Evaluasi

Sterilisasi protein dapat dilakukan dengan aplikasi PyMOL dan data *binding afinity* serta RMSD diperoleh dari aplikasi PyRx. *Binding afinity* dihubungkan untuk menentukan jarak antara molekul aktif dan protease.

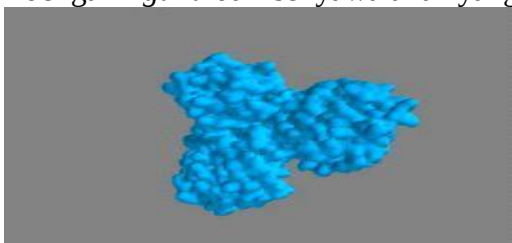
3. Hasil dan Pembahasan

Visual gambar Protease 7kOe yang sudah steril diperoleh dari aplikasi PyMOL. Sementara itu, data angka *Binding Affinity* dan RMSD diperoleh dari aplikasi PyRx. Nilai RMSD dan *Binding Affinity* dihubungkan untuk menentukan jarak dan tarikan antara molekul aktif dan protease.



Gambar 2. Visualisasi model 3D protein 7kOe (Courtesy/Jihan Fadhilah Zahran)

Setelah protease 7kOe disterilkan pada aplikasi PyMOL dilanjutkan dengan menggunakan aplikasi PyRx Version 0.8 (python.exe) 32 Bit dengan cara pengaplikasian protease 7kOe yang telah steril dengan *ligand* dari senyawa aktif yang digunakan.



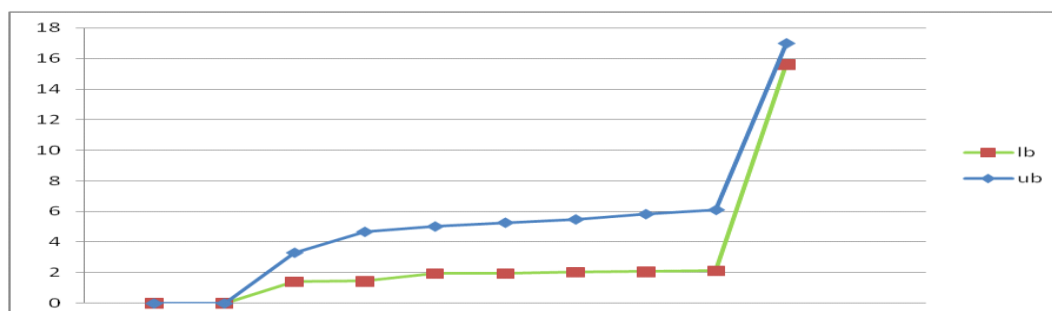
Gambar 3. Molecular Surface protein 7kOe (Courtesy/Jihan Fadhilah Zahran)

Tabel 1. Hasil *Molecular Docking* senyawa aktif Casbene dengan Protease 7kOe

Ligand	Binding	rmsd/lb	rmsd/ub
--------	---------	---------	---------

	Afinity		
Protease_Steril_7kOe_5280437_uff_E=1575.97	-7,1	0	0
Protease_Steril_7kOe_5280437_uff_E=1575.97	-6,3	1,405	3,31
Protease_Steril_7kOe_5280437_uff_E=1575.97	-6,4	1,449	4,676
Protease_Steril_7kOe_5280437_uff_E=1575.97	-6,4	1,943	5,022
Protease_Steril_7kOe_5280437_uff_E=1575.97	-6,6	1,95	5,269
Protease_Steril_7kOe_5280437_uff_E=1575.97	-6,3	2,039	5,484
Protease_Steril_7kOe_5280437_uff_E=1575.97	-6,6	2,072	5,829
Protease_Steril_7kOe_5280437_uff_E=1575.97	-6,4	2,125	6,102
Protease_Steril_7kOe_5280437_uff_E=1575.97	-6,8	15,627	16,971

Dari protein 7kOe yang disterilkan dengan PyMOL kemudian direaksikan dengan *ligand* dari senyawa aktif yang digunakan dengan menggunakan aplikasi PyRx untuk memperoleh *binding afinity* dan RMSD nya.



Gambar 4. Grafik RMSD vs *Binding Affinity* (Courtesy/Jihan Fadhilah Zahran)

4. Kesimpulan

Pada pemurnian dan molecular docking dengan senyawa aktif Casbene dengan Protease SARS-CoV-2 Omicron Variant S Varian 7KOE menggunakan aplikasi PyMol dan PyRx telah berhasil dilakukan. Dengan hasil diperoleh molekul aktif dengan SMILES CC1=CCCC(=CC2C(C2(C)C)CCC(=CCC1)C)C. Hasil yang didapatkan nilai Binding Afinity (kka/mol) yaitu 3,31; 4,676; 5,022; 5,269; 5,484; 5,829; 6,102; 16,971 dengan RMSD *upper bound* 0 dan 1,405; 1,449; 1,943; 1,95; 2,039; 2,072; 2,125; 15,627 dengan RMSD *lower bound* 0.