

ARTICLE

Pemurnian dan Molecular Docking Senyawa Aktif *9-hexadecenoic acid* dengan Protease SARS-CoV-2 Varian 1C6Y Menggunakan PyMOL dan PyRx

Annisa Aulia^a, Fadhilah Savitri Armas^b, Latifa Permata Gusti^c

^aDepartment of Biology, Faculty of Mathematic and Natural Science, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

^bDepartment of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Science, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

^cDepartment of Chemistry, Faculty of Mathematic and Natural Science, Universitas Negeri Padang, Padang, Indonesia

*Corresponding email: latifapermatagusti02@gmail.com

ABSTRAK

Riset ini bertujuan untuk memurnikan dan kajian molecular docking senyawa aktif *9-hexadecenoic acid* dari tanaman *Abelmoschus Esculentus* dengan virus SARS-CoV-2 varian 1C6Y. Metode yang digunakan aplikasi PyMOL versi 1.7.4.5-Win32.msi. dan PyRx versi 0.8 (python.exe) 32 Bit. Kajian dilakukan dengan mengobservasi konformasi 3D pada molekul dan ligand yang digunakan. Perangkat yang digunakan adalah prosesor Intel(R) Celeron(R) N4000 CPU @ 1.10GHz 1.10 GHz, RAM 2 GB. Protease 1C6Y diambil dari situs protein databank (PDB) (<https://www.rcsb.org/>). Screening molekul aktif menggunakan situs Dr.Duke (www.phytochem.com). Senyawa aktif didapatkan dari Pubchem (www.pubchem.com). Hasil docking didapatkan nilai Binding Affinity (kkal/mol) untuk masing-masing RMSD Lower Bond 0,0; 2,091; 2,807; 2,446; 2,415; 3,014; 2,66; 3,643; 2,463. Dan untuk RMSD Upper Bond 0,0; 3,397; 7,054; 4,313; 7,606; 6,699; 7,367; 7,781; 7,703.

ARTICLE HISTORY

Submission: 10 Maret 2022

Revised: 12 Mei 2022

Accepted: 13 Juni 2022

Published: 14 Junia 2022

Citation:

Keywords: SARS-CoV-2,
Varian 1C6Y, PyMOL,
PyRx

1. Pendahuluan

Tanaman Okra (*Abelmoschus Esculentus*) merupakan tanaman yang dapat tumbuh pada daerah tropis dan sub-tropis. Tanaman Okra adalah tanaman yang berasal dari Afrika. Tanaman Okra disebut “sayuran penduduk desa yang sempurna” karena sifatnya yang kuat, serat makanan, dan keseimbangan protein biji yang berbeda. Tanaman Okra belum dibudidayakan secara luas karena masih terbatasnya pengetahuan masyarakat tentang manfaat dan penggunaannya.

Tanaman Okra lebih dikenal sebagai tanaman yang multifungsi karena hampir semua bagian tanaman dapat dimanfaatkan. Salah satunya bagian biji okra yang merupakan sumber protein dan minyak yang kaya akan asam lemak tak jenuh seperti asam palmitoleat (*9-hexadecenoic acid*) yang

bermanfaat untuk kesehatan manusia. Namun analisa mengenai senyawa aktif 9-hexadecenoic acid dari tumbuhan Okra ini masih belum banyak diketahui oleh masyarakat.

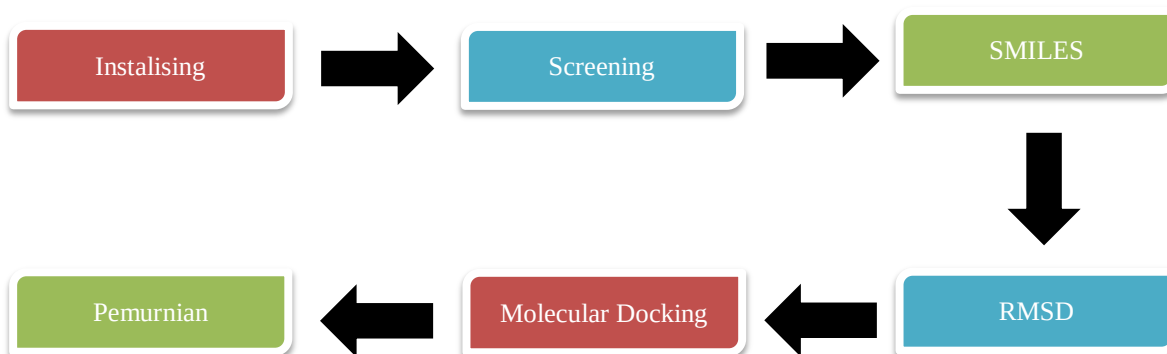
Oleh karena itu, dilakukan studi komputasi untuk mengetahui kandungan senyawa aktif yang terdapat didalam tanaman okra. Tujuan dari riset ini adalah untuk menganalisis kandungan senyawa aktif 9-hexadecenoic acid dari tanaman Okra (*Abelmoschus Esculentus*) dengan protease spike SARS-Cov-2 varian 1C6Y menggunakan software PyMOL dan PyRx.

2. Metode

2.1 Persiapan

Senyawa aktif 9-hexadecenoic acid diambil dari situs Dr. Duke (www.phytochem.com), dan SMILES model diperoleh dari situs Pubchem(www.pubchem.com). Uji komputasi dilakukan dengan menggunakan komputer prosesor Intel(R) Celeron(R) N4000 CPU @ 1.10GHz 1.10 GHz, RAM 2 GB. Perangkat lunak yang digunakan yaitu PyMOL versi 1.7.4.5-Win32.msi dan PyRx versi 0.8 (python.exe) 32 Bit.

2.2 Pelaksanaan



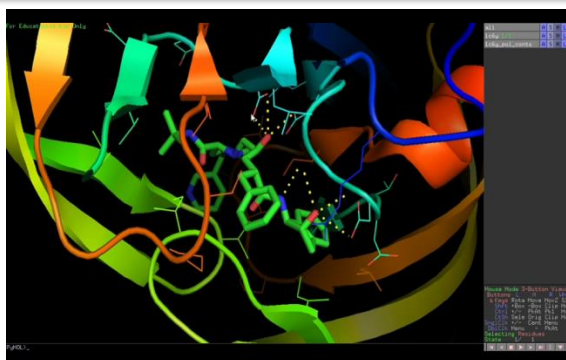
Pelaksanaan dimulai dengan menginstal aplikasi PyMOL dan PyRx terlebih dahulu, kemudian dilakukan Screening molekul aktif menggunakan situs Dr. Duke. Setelah melakukan *screening* dilakukan pencarian SMILES dari senyawa aktif yang digunakan di situs Pubchem. Pemurnian molekul dilakukan pada aplikasi PyMOL selanjutnya dilakukan proses molekular *docking* pada aplikasi PyRx sehingga diperoleh *Binding Afinity* dan RMSD.

2.3 Evaluasi

Proses pemurnian protease SARS- CoV-2 varian 1C6Y dengan menggunakan PyMOL telah berhasil dilakukan dan proses docking molekular protease sesuai dengan senyawa aktif yang dibaca.

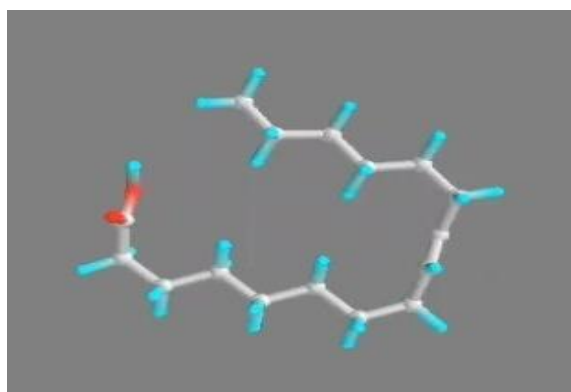
3. Hasil dan Pembahasan

Protein target SARS-CoV-2 varian 1C6Y disterilisasi dengan menggunakan aplikasi Pymol untuk menghilangkan molekul air yang ditandai dengan adanya bercak-bercak merah dan native ligand berupa DMS yang terdapat pada sequen sehingga diperoleh protein yang telah terbebaskan dari molekul air dan native ligand. Hal ini dikarenakan native ligan dan molekul air merupakan kontaminan dalam protein yang akan mengganggu kerja obat sehingga menyebabkan berpengaruh pada binding affinity saat melakukan percobaan docking.



Gambar 1. Visualisasi model 3D protein SARS-CoV-2 varian 1C6Y

Proses selanjutnya dilakukan molekular docking menggunakan software PyRx dengan program Autodock dan dibuat makromolekul dari protease steril yang digunakan. Kemudian ligand dari senyawa aktif yang akan digunakan yaitu *9-hexadecenoic acid* diinputkan ke PyRx untuk diaplikasikan ke makromolekul untuk memperoleh binding affinity dan RMSDnya.

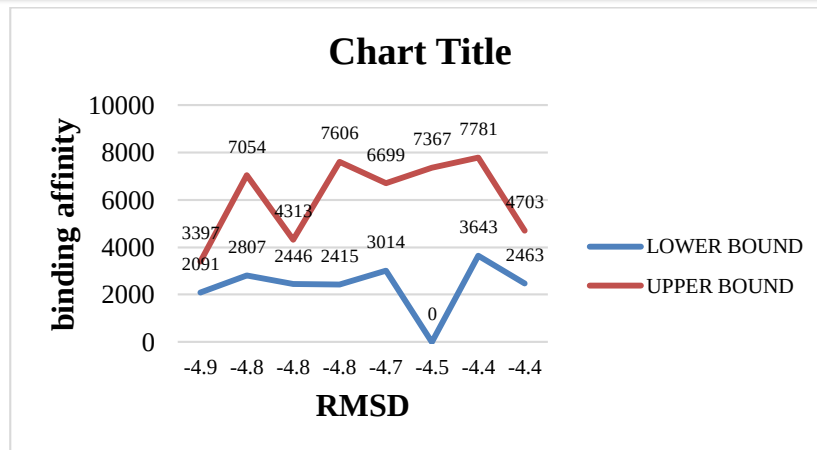


Gambar 2. Visualisasi ligan dari senyawa aktif

Berikut merupakan nilai Binding affinity dan RM|SD yang diperoleh

Tabel 1. Hasil *RMSD* dan *BA* menggunakan aplikasi PyRx

Ligan	Binding Affinity (kcal/mol)	RMSD lower bound	RMSD upper bound
STERIL_5282745_uff_E=50.69	-5.0	0,0	0,0
STERIL_5282745_uff_E=50.69	-4.9	2,091	3,397
STERIL_5282745_uff_E=50.69	-4.8	2,807	7,054
STERIL_5282745_uff_E=50.69	-4.8	2,446	4,313
STERIL_5282745_uff_E=50.69	-4.8	2,415	7,606
STERIL_5282745_uff_E=50.69	-4.7	3,014	6,699
STERIL_5282745_uff_E=50.69	-4.5	2,66	7,367
STERIL_5282745_uff_E=50.69	-4.4	3,643	7,781
STERIL_5282745_uff_E=50.69	-4.4	2,463	4,703



Grafik binding affinity dan RMSD

4. Conclusion

Berdasarkan pengujian yang dilakukan dapat disimpulkan bahwa proses pemurnian protease SARS-CoV-2 varian 1C6Y dengan menggunakan PyMOL dan proses docking molekular menggunakan PyRx telah berhasil dilakukan dengan nilai *Binding Afinity* (kkal/mol) untuk masing-masing RMSD *Lower Bond* 0,0; 2,091; 2,807; 2,446; 2,415; 3,014; 2,66; 3,643; 2,463. Dan untuk RMSD *Upper Bond* 0,0; 3,397; 7,054; 4,313; 7,606; 6,699; 7,367; 7,781; 7,703. Riset lanjutan perlu dilakukan kajian yang lebih mendalam.