

# Molecular Docking Rancangan sgRNA Variasi Panjang Spacer Repeat dan TracrRNA untuk Produksi CRISPR-Cas9 dan dCas9 *Geobacillus kaustophilus* = Molecular Docking of sgRNA Design with Length Variation of Spacer Repeat and TracrRNA for Production of *Geobacillus kaustophilus* CRISPR-Cas9 and dCas9

Maheswara Pramayuditya, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920524491&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

CRISPR-Cas9 dan CRISPR-dCas9 adalah teknologi gen yang sangat dibutuhkan untuk kegiatan produksi dan kebutuhan diagnosis. Namun, Cas9 dan dCas9 yang paling banyak digunakan dalam CRISPR-Cas9 dan dCas9 saat ini, yang dihasilkan dari *Streptococcus pyogenes*, tergolong dalam Cas9 dan dCas9 mesofilik yang akan terdenaturasi saat suhu diatas 45oC sehingga butuh versi yang lebih kuat, yaitu Cas9 dan dCas9 termofilik. Dalam eksplorasi di Mata Air Panas Cisolong, Banten, Cas9 termofilik berhasil ditemukan dalam *Geobacillus kaustophilus*. Namun, belum ada studi rancangan panjang setiap bagian sgRNA yang tepat terhadap Cas9 dan dCas9 *Geobacillus kaustophilus*. Penelitian ini menjawab permasalahan tersebut dengan simulasi molecular docking dengan menggunakan website HDOCK untuk menguji interaksi antara variasi panjang setiap bagian sgRNA, yaitu spacer, repeat, dan tracrRNA, di Cas9 dan dCas9 *Geobacillus kaustophilus* dilihat dari besar afinitas pengikatan. Interaksi antarmolekul dari hasil simulasi tersebut dianalisis dengan Ligplot+. Hasil molecular docking menunjukkan bahwa sgRNA yang cocok untuk Cas9 dan dCas9 *Geobacillus kaustophilus* adalah sgRNA variasi tracrRNA 63 nt. Perubahan panjang bagian sgRNA cenderung mempengaruhi jumlah ikatan yang terbentuk dalam kompleks sgRNA-Cas9 dan dCas9 *Geobacillus kaustophilus* sehingga mempengaruhi nilai afinitas pengikatan yang dihasilkan.

.....CRISPR-Cas9 and CRISPR-dCas9 are gene technologies that urgently needed for production activities and diagnosis. However, the Cas9 and dCas9 that are most widely used in CRISPR-Cas9 and dCas9 at present, which are produced from *Streptococcus pyogenes*, belong to the mesophilic Cas9 and dCas9 which will be denatured when the temperature is above 45oC so a stronger version is needed, namely thermophilic Cas9 and dCas9. During exploration at Cisolong Hot Springs, Banten, thermophilic Cas9 was found in *Geobacillus kaustophilus*. However, there is no proper sgRNA segment length study design against Cas9 and dCas9 *Geobacillus kaustophilus*. This study addresses this problem by simulating molecular docking using the HDOCK website to examine the interaction between variations in the length of each sgRNA section, namely spacer, repeat, and tracrRNA, in Cas9 and dCas9 *Geobacillus kaustophilus* seen from the large binding affinity. The intermolecular interactions from the simulation results were analysed with Ligplot+. Molecular docking results showed that the sgRNA suitable for Cas9 and dCas9 *Geobacillus kaustophilus* was 63 nt tracrRNA variation. Changing the length of the sgRNA section tends to affect the number of bonds formed in the sgRNA-Cas9 and dCas9 *Geobacillus kaustophilus* complexes thereby affecting the resulting binding affinity values.