

ABSTRAK

Nama : Nurul Wulandari
Program Studi : Farmasi
Judul : Desain Vaksin Multi Epitope Dari RNA-Dependent RNA-Polymerase Pada SARS-CoV-2: Pendekatan Immunoinformatika

Coronavirus disease 2019 (COVID-19) merupakan penyakit menular yang disebabkan oleh virus corona dan menyerang saluran pernafasan. Meskipun telah dilakukan vaksinasi COVID-19 secara besar-besaran dalam skala global, terdapat kebutuhan yang meningkat untuk mengembangkan vaksin dan obat yang lebih efektif untuk mengekang penyebaran COVID-19. Penelitian ini berbasis pemetaan peptida (epitope) dari RNA-dependent RNA-polymerase pada SARS-CoV-2. Metode yang digunakan adalah metode *in silico* melalui komputasi molekuler dengan tahapan: pengambilan sekuens dari GenBank, analisis sifat fisika kimia, analisis epitope sel T dan sel B, rancangan epitope kandidat vaksin dan penambatan molekuler. Hasil penelitian diperoleh sifat fisika kimia dari kandidat vaksin SARS-CoV-2 yang stabil dengan indeks ketidakstabilan 30,63. Kandidat vaksin bersifat antigen, *non-allergen*, dan tidak memiliki kesamaan dengan reseptor tubuh manusia. Kandidat vaksin memiliki model epitope yang baik, dibuktikan dengan nilai *Clash score* 0,00 dan nilai *Ramachandran Favored* sebesar 79,07%. Berdasarkan hasil penambatan molekuler, kandidat vaksin mampu membentuk kompleks molekuler dengan *Toll-like Receptor* 8 (TLR-8) dengan nilai interaksi yang kuat yaitu sebesar -93.8 dan RMSD sebesar 0.8 Å.

Kata Kunci :

COVID-19, Epitope, RNA-Dependent RNA-Polymerase, SARS-CoV-2, Toll-like receptor 8.

ABSTRACT

Name : Nurul Wulandari
Major : Farmasi
Title : Multi-Epitope Vaccine Design Of RNA-Dependent RNA-Polymerase In SARS-CoV-2: Immunoinformatics Approach

Coronavirus disease 2019 (COVID-19) is an infectious disease caused by the corona virus and attacking the respiratory tract. Despite massive COVID-19 vaccinations on a global scale, there is a growing need to develop more effective vaccines and drugs to curb the spread of COVID-19. This study is based on peptide (epitope) mapping of RNA-dependent RNA-polymerase in SARS-CoV-2. The method used is an in silico method through molecular computing with stages: sequence retrieval from GenBank, analysis of chemical physical properties, analysis of T cell and B cell epitope, epitope design of vaccine candidates and molecular tethering. The results of the study obtained the chemical physical properties of a stable SARS-CoV-2 vaccine candidate with an instability index of 30.63. Vaccine candidates are antigens, non-allergens, and have nothing in common with the receptors of the human body. The vaccine candidate has a good epitope model, evidenced by a Clash score of 0.00 and a Ramachandran Favored value of 79.07%. Based on the results of molecular tethering, the vaccine candidate is able to form a molecular complex with Toll-like Receptor 8 (TLR-8) with a strong interaction value of -93.8 and RMSD of 0.8 Å.

Keywords:

COVID-19, Epitope, RNA-Dependent RNA-Polymerase, SARS-COV2, Toll-like receptor 8