INTISARI

FIRMANSYAH, M.A., 2021, PENAMBATAN DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER ANTARA DESAIN VAKSIN DENGAN ADJUVAN RIBOSOMAL 50S L7/L12 DAN TOLL LIKE RECEPTOR 3 (TLR3), PROPOSAL SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI.

Virus corona baru yang bernama SARS-CoV-2 menjadi pandemi global yang sampai hari ini masih berkembang. Beberapa negara berlomba dalam mengembangkan vaksin yang aman dan efektif. Vaksin yang berkembang hari tidak efektif dikarenakan diperlukan dosis penguat. Beberapa vaksin hari ini mulai turun efektivitas netralisasinya dikarenakan virus yang terus bermutasi. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui interaksi atom desain vaksin dengan Toll Like Receptor 3, sehingga mendapatkan desain yang efektif dan stabil yang dinilai dengan nilai RMSD dan RMSF dari simulasi dinamika molekuler.

Pembuatan desain vaksin dilakukan dengan menggunakan basis *webserver*. Desain Vaksin dibuat dengan menggunakan sequen yang didapatkan dari Uniprot. Sekuen dengan antigenitas tertinggi dilakukan identifikasi Epitop MHC-1, II, dan Sel B. Epitop dilakukan konstruksi 3D dengan menggabungkan epitop yang didapatkan dengan adjuvan *Ribosomal 50S L7/L12*. Penambatan molekuler dilakukan dengan menggunakan HADDOCK 2.4, serta simulasi dinamika molekuler menggunakan YASARA.

Desain vaksin yang didapatkan memiliki antigenitas 0.5114, desain vaksin juga memiliki diprediksi stabil secara struktur dengan bobot molekul 42.47 Kda, memiliki nilai GRAVY -0.056, Nilai Procheck 86.15%, dan ERRAT 0 error. Penambatan molekuler memiliki nilai -104.867.Simulasi dinamika molekuler menggunakan YASARA mendapatkan rata-rata RMSD 5.12 dan RMSF 2.01 Angstrom. Nilai penambatan molekuler HADDOCK 2.4 memiliki nilai yang baik sehingga dapat disimpulkan desain vaksin dengan adjuvan *Ribosomal 50S L7/L12* dan TLR 3 diprediksi memiliki efektivitas dalam merespon imun sedangkan nilai rata-rata RMSD dan RMSF yang dihasilkan dari simulasi dinamika molekuler juga menunjukkan bahwa desain vaksin dengan adjuvan *Ribosomal 50S L7/L12* dan TLR 3 dapat berikatan kuat dalam menimbulkan respon imun.

Kata Kunci : SARS-CoV-2, desain vaksin, penambatan molekuler, dinamika molekuler

ABSTRACT

FIRMANSYAH, M.A., 2021, DOCKING AND SIMULATION OF MOLECULAR DYNAMICS BETWEEN VACCINE DESIGN WITH RIBOSOMAL 50S L7/L12 ADJUVANTS AND TOLL LIKE RECEPTOR 3 (TLR3), UNDERGRADUATE OF THESIS, BACHELOR OF SYUDY PHARMACEUTICAL, SETIA BUDI UNIVERSITY.

The new corona virus named SARS-CoV-2 has become a global pandemic which is still developing to this day. Several countries are racing to develop a safe and effective vaccine. The developing vaccine is ineffective because a booster dose is required. Some vaccines today are starting to lose their neutralization effectiveness because the virus continues to mutate. This study aims to determine the interaction of atomic vaccine design with Toll Like Receptor 3, so as to obtain an effective and stable design that is assessed by the RMSD and RMSF values from molecular dynamics simulations.

Vaccine design is made using a webserver. The vaccine design was made using sequences obtained from Uniprot. Sequences with the highest antigenicity were identified with Epitope MHC-1, II, and B cells. Epitope was constructed in 3D by combining the obtained epitope with Ribosomal 50S L7/L12 adjuvants. Molecular anchoring was carried out using HADDOCK 2.4, as well as molecular dynamics simulation using YASARA.

The vaccine design obtained has an antigenicity of 0.5114, the vaccine design is also predicted to be structurally stable with a molecular weight of 42.47 Kda, has a GRAVY value of -0.056, a Procheck value of 86.15%, and an ERRAT of 0 error. Molecular anchoring has a value of -104.867. Molecular dynamics simulation using YASARA obtained an average RMSD of 5.12 and RMSF of 2.01 Angstrom. The molecular anchoring value of HADDOCK 2.4 has a good value, so it can be concluded that the vaccine design with Ribosomal 50S L7/L12 and TLR 3 adjuvants is predicted to have effectiveness in responding to the immune system, while the average value of RMSD and RMSF resulting from molecular dynamics simulations also shows that the vaccine design withadjuvants 50S L7/L12 and TLR 3 can bind strongly to induce an immune response.
Keywords: SARS-CoV-2, vaccine design, molecular tethering, molecular dynamics.