

**KANDIDAT DESAIN VAKSIN
VARICELLA ZOSTER VIRUS (VZV)
STRAIN DUMAS P09257 : STUDI *IN-SILICO***

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar
Sarjana Farmasi**



**REVA ELIFTIANA
31121046**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2025**

ABSTRAK

Kandidat Desain Vaksin Varicella Zoster Virus (VZV)

Strain Dumas P09257 Studi : *In Silico*

Reva Eliftiana

S-1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Varisela yang disebabkan oleh *Varicella Zoster Virus* (VZV) merupakan infeksi virus yang ditandai oleh kemerahan, pembengkakan, pembentukan vesikel, dan keterlibatan mukosa. Strain Dumas dari VZV dikenal sangat menular, menyebar melalui droplet dan kontak langsung, serta menjadi perhatian global karena dapat menyebabkan dua bentuk penyakit klinis, yakni varisela (cacar air) dan herpes zoster (cacar ular). Penelitian ini bertujuan mengidentifikasi epitop peptida potensial dari strain Dumas menggunakan pendekatan *in-silico*, serta mengevaluasi interaksinya dengan protein target imun (TLR-3, MHC kelas I dan II). Melalui pemodelan molekuler dan prediksi struktur berbasis bioinformatika, penelitian ini berhasil mengidentifikasi empat epitop dengan antigenisitas tinggi ($>0,4$) dan afinitas kuat terhadap MHC-I dan MHC-II, menjadikannya kandidat vaksin yang menjanjikan. Hasil *molecular docking* menunjukkan interaksi stabil antara epitop dengan TLR3, HLA-A*11:01, dan HLA-DR1, mengindikasikan potensi pemicu respons imun. Simulasi dinamika molekuler mengonfirmasi kestabilan struktural, sementara analisis cakupan imunogenik menunjukkan estimasi cakupan populasi global sebesar 94,21%. Validasi model vaksin 3D melalui tr-Rosetta dan ERRAT2 menghasilkan skor kualitas struktur sebesar 96,3%. Secara keseluruhan, temuan ini menunjukkan bahwa epitop yang diidentifikasi memiliki potensi kuat sebagai kandidat vaksin peptida terhadap infeksi VZV, khususnya strain Dumas, dan membuka peluang pengembangan vaksin berbasis pendekatan komputasi *modern*.

Kata Kunci: Varicella Zoster Virus, *in-silico*, Epitop peptida, *Molecular docking*, *Vaccine design*

Abstract

*Varicella, caused by the Varicella Zoster Virus (VZV), leads to redness, swelling, vesicle formation, and mucosal involvement. The Dumas strain of VZV is a highly contagious human herpesvirus that spreads through droplets and direct contact, posing a significant global health concern due to its dual clinical manifestations varicella (chickenpox) and herpes zoster (shingles). This study aims to identify potential peptide epitopes of the Dumas strain using an in-silico approach, analyze their molecular interactions with target proteins (TLR-3, MHC I, and MHC II), and evaluate their immunogenic potential. A bioinformatics-based in-silico approach was used, including molecular modeling and structural predictions. This method enables systematic epitope characterization without laboratory experiments. The results identified four epitopes with antigenicity above 0.4, exhibiting high affinity for MHC-I and MHC-II, making them strong vaccine candidates. Molecular docking showed strong binding with TLR3, HLA-A*11:01, and HLA-DR1, indicating a potential immune response. Molecular dynamics simulations confirmed structural stability, and immunogenicity evaluation showed a 94,21% population coverage. The 3D vaccine model, validated using tr-Rosetta and ERRAT2 (96,3%), demonstrated stable in-silico interactions. These findings suggest the identified epitopes as promising candidates for peptide-based VZV vaccine development.*

Keywords: Varicella Zoster Virus, in-silico, peptide epitope, molecular docking, vaccine design.