

**PERANCANGAN VAKSIN BERBASIS EPITOP PEPTIDA
VIRUS MONKEYPOX STRAIN ZAIRE 96-I-16:
*IN SILICO***

SKRIPSI



**RIO ANGGI SETIAWAN
31121159**

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

**PERANCANGAN VAKSIN BERBASIS EPITOP PEPTIDA
VIRUS MONKEYPOX STRAIN ZAIRE 96-I-16:
*IN SILICO***

SKRIPSI

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



**RIO ANGGI SETIAWAN
31121159**

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

ABSTRAK

Perancangan Vaksin Berbasis Epitop Peptida Virus Monkeypox

Strain Zaire 96-I-16: *In Silico*

Rio Anggi Setiawan

S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Virus monkeypox (MPXV) strain Zaire 96-I-16 merupakan patogen dengan tingkat virulensi dan mortalitas tinggi yang memerlukan strategi vaksinasi efektif. Penelitian ini merancang vaksin berbasis epitop peptida untuk virus monkeypox (MPXV) strain Zaire 96-I-16 menggunakan pendekatan *in silico* melalui analisis protein dari database UniProt, prediksi antigenitas dengan VaxiJen 2.0, identifikasi epitop sel T menggunakan NetCTL 1.2 dan Tepitool IEDB, serta prediksi epitop sel B dengan IEDB. Konstruksi vaksin menggabungkan epitop terpilih dengan linker dan adjuvan 50S Ribosomal Protein L7/L12, menghasilkan desain vaksin final berukuran 365 asam amino (39.604,60 Da) yang mengintegrasikan 12 epitop MHC-I, 4 epitop MHC-II, dan 1 epitop sel B linear (SIRSANMSAPFD). Karakterisasi struktural menunjukkan stabilitas baik dengan *instability index* 38,31, validasi Ramachandran plot 96,5%, dan nilai kualitas ERRAT 100%, sementara analisis *molecular docking* mengkonfirmasi interaksi kuat dengan reseptor sistem imun (TLR3, HLA-A 11*01, dan HLA-DR1). Simulasi respons imun menunjukkan kemampuan vaksin menginduksi respons komprehensif termasuk produksi IgM, aktivasi sel T-helper dan T-sitotoksik, serta produksi interferon-gamma, meskipun *population coverage* untuk Indonesia hanya 69,9%, membuktikan feasibilitas pendekatan *in silico* dalam pengembangan vaksin monkeypox yang memerlukan validasi eksperimental lebih lanjut.

Kata Kunci: Immunoinformatika, *In Silico*, MHC Binding, Monkeypox, Epitop Peptida

Abstract

The monkeypox virus (MPXV) strain Zaire 96-I-16 is a pathogen with high virulence and mortality rates that requires effective vaccination strategies. This research designed an epitope-based peptide vaccine for monkeypox virus (MPXV) strain Zaire 96-I-16 using an *in silico* approach through protein analysis from the UniProt database, antigenicity prediction with VaxiJen 2.0, T-cell epitope identification using NetCTL 1.2 and Tepitool IEDB, and B-cell epitope prediction with IEDB. Vaccine construction combined selected epitopes with linkers and 50S Ribosomal Protein L7/L12 adjuvant, resulting in a final vaccine design of 365 amino acids (39,604.60 Da) integrating 12 MHC-I epitopes, 4 MHC-II epitopes, and 1 linear B-cell epitope (SIRSANMSAPFD). Structural characterization showed good stability with an *instability index* of 38.61, Ramachandran plot validation of 96.5%, and ERRAT quality value of 100%, while molecular docking analysis confirmed strong interactions with immune system receptors (TLR3, HLA-A 11*01, and HLA-DR1). Immune response simulation demonstrated the vaccine's ability to induce comprehensive responses including IgM production, T-helper and cytotoxic T-cell activation, and interferon-gamma production, although *population coverage* for Indonesia was only 69.9%, proving the feasibility of *in silico* approaches in monkeypox vaccine development that requires further experimental validation.

Keywords: Immunoinformatic, *In silico*, MHC Binding, Monkeypox, Peptide Epitope