

ANALISIS *IN SILICO* PROTEIN A35R SEBAGAI ANTIGEN VAKSIN SUBUNIT VIRUS *MONKEYPOX*

SILMI AULIA PUTRI
NIM.1217020079

ABSTRAK

Monkeypox merupakan penyakit zoonotik yang kembali menjadi perhatian global dengan sejumlah besar kasus terkonfirmasi dan kematian yang tercatat secara global sejak awal tahun 2022 hingga pertengahan 2024. Meskipun kasus di Indonesia relatif terkendali, potensi infeksi dan efek samping serius seperti mioperikarditis dan perikarditis tetap menjadi perhatian. Penelitian ini bertujuan menganalisis potensi protein A35R sebagai kandidat antigen vaksin subunit *Monkeypox* melalui pendekatan *in silico*. Metodologi yang digunakan mencakup prediksi epitop, uji antigenitas, imunogenitas, toksisitas, alergenitas, pengecekan homologi terhadap protein manusia, *molecular docking*, validasi dengan evaluasi MM/GBSA, dan analisis ikatan hidrogen. Hasil prediksi menunjukkan terdapat 176 epitop, dengan 28 di antaranya memenuhi kriteria *eluted ligand* yang mengindikasikan potensi kuat untuk dipresentasikan oleh HLA kelas I. Proporsi 15,91% epitop potensial ini mencerminkan efisiensi prediksi yang lebih baik dibandingkan beberapa studi sebelumnya pada protein lain. Selain itu, ditemukan indikasi cakupan populasi yang lebih luas. Dari 28 peptida yang lolos seleksi awal, 10 epitop memenuhi seluruh kriteria keamanan dan efektivitas, termasuk uji non-toksisitas dan non-alergenitas, dengan 83,3% terdeteksi sebagai non-alergenik. Evaluasi efektivitas menggunakan *molecular docking* menghasilkan skor energi ikatan yang kuat, berkisar antara -160,047 hingga -266,890, dan energi ΔG_{bind} berdasarkan MM/GBSA berkisar -51,84 hingga -86,84. Analisis ikatan hidrogen menunjukkan bahwa seluruh kompleks epitop-HLA membentuk interaksi pada *Pocket* utama F dan B serta *Pocket* pendukung A, C, D, dan E, yang berperan penting dalam stabilisasi kompleks dan pengenalan antigen oleh sel T. Temuan ini secara signifikan menunjukkan bahwa protein A35R memiliki potensi kuat sebagai kandidat antigen vaksin subunit untuk virus *Monkeypox*.

Kata kunci: *A35R, desain vaksin, in silico, Monkeypox, vaksin subunit*

***IN SILICO* ANALYSIS OF A35R PROTEIN AS *MONKEYPOX* VIRUS SUBUNIT VACCINE ANTIGEN**

SILMI AULIA PUTRI
NIM.1217020079

ABSTRACT

Monkeypox is a re-emerging zoonotic disease that has garnered global attention, with a substantial number of confirmed cases and deaths recorded worldwide from early 2022 to mid-2024. While cases in Indonesia remain relatively controlled, the potential for infection and serious side effects, such as myopericarditis and pericarditis, remains a significant concern. This study aims to analyze the potential of A35R protein as a subunit vaccine antigen candidate for Monkeypox using an *in silico* approach. The methodology employed includes epitope prediction, antigenicity, immunogenicity, toxicity, and allergenicity testing, as well as homology checking against human proteins, molecular docking, validation with MM/GBSA evaluation, and hydrogen bond analysis. The prediction results indicate the presence of 176 epitopes, with 28 of them meeting the eluted ligand criteria, suggesting a strong potential for presentation by HLA class I. This proportion of 15.91% potential epitopes reflects better prediction efficiency compared to some previous studies on other proteins. Furthermore, the findings suggest broader population coverage. Out of the 28 peptides that passed initial screening, 10 epitopes fulfilled all safety and effectiveness criteria, including non-toxicity and non-allergenicity, with 83.3% identified as non-allergenic. Effectiveness evaluated through molecular docking yielded strong binding energy scores ranging from -160.047 to -266.890, and ΔG_{bind} energies based on MM/GBSA ranged from -51.84 to -86.84. Hydrogen bond analysis revealed that all epitope-HLA complexes formed interactions within the main F and B Pockets, as well as the auxiliary A, C, D, and E Pockets, which are crucial for complex stabilization and T-cell antigen recognition. These findings significantly demonstrate that A35R protein holds strong potential as a subunit vaccine antigen candidate for the Monkeypox virus.

Keywords: A35R, in silico, Monkeypox, vaccine design, vaccine subunit