

PREDIKSI STRUKTUR PROTEIN 3 DIMENSI DAN VAKSIN PEPTIDE SARS COV2

Mohammad Yusuf Alamudi^{1,2,3,4}

¹Mohammad Raihan Alamudi Institute

²Stikes Majapahit Mojokerto

³UIN Sunan Ampel Surabaya

⁴APIDA Jawa timur

* Email: myusufalamudi@hotmail.com

Abstrak

SARS CoV2 masih terus bersirkulasi baik di Indonesia dan di dunia. Lebih dari 3 juta orang terinfeksi dan lebih dari 500 ribu orang meninggal. Kasus di Indonesia lebih dari 5 juta orang terinfeksi dan lebih dari 100 ribu orang meninggal. Dibutuhkan vaksin memiliki spectrum luas untuk pencegahan SARS CoV2, salah satunya dengan memprediksi struktur protein struktur 3 dimensi dan vaksin peptide untuk SARS CoV2. Tujuan penelitian adalah menganalisis Struktur Protein 3 Dimensi dan Vaksin peptide SARS COV2. Hasil penelitian adalah didapatkan struktur protein struktur 3 dimensi dan vaksin peptide untuk SARS CoV2. Kesimpulan hasil penelitian ini adalah struktur protein struktur 3 dimensi dan vaksin peptide untuk SARS CoV2, dibutuhkan kajian lebih lanjut dengan uji pre klinik dan uji klinik.

Kata kunci: : SARS CoV2, struktur protein, vaksin peptide

PENDAHULUAN

Pandemi *Coronavirus Disease* 2019 (COVID-19) masih menginfeksi semua negara di dunia, tidak terkecuali Indonesia. Bahkan saat ini telah muncul strain baru dari virus corona tersebut. Angka pasien COVID-19 masih tinggi, menurut data WHO per tanggal 18 November 2022, jumlah pasien COVID-19 dunia mencapai lebih dari 131.020.967 orang, dan untuk Indonesia mencapai lebih dari 1.534.255 (Adnan et al, 2020). Vaksin merupakan salah satu solusi terbaik untuk menanggulangi pandemi COVID-19. Vaksin masih terus dikembangkan sampai saat ini, meskipun beberapa perusahaan bioteknologi sudah berhasil menemukannya. Ada beberapa alasan vaksin masih terus dikembangkan sampai saat ini, salah satunya adalah dari sisi struktur vaksin.

Struktur vaksin yang saat ini ada adalah untai mRNA, belum berdasarkan peptida. Vaksin peptida memiliki keunggulan dari segi spesifisitas penyakit, kemurnian, kapasitas produksi, dan efisiensi biaya produksi. Berdasarkan hal tersebut maka perlu ada upaya pengembangan vaksin COVID-19 berbasis peptide (Joshi et al, 2020). Pendekatan imunoinformatika dianggap metode yang paling baik dalam mendesain vaksin *modern*, karena memberikan petunjuk atas metode *trial and error* metode klasik di laboratorium basah (Joshi et al, 2020). Investigasi kami diharapkan dapat membuka dimensi baru dalam menyusun rejimen vaksin berbasis peptida spike SARS-CoV-2. Disamping itu, penelitian ini dilakukan karena belum pernah dilakukannya studi *in silico* *The Immune Epitope Database Analysis Resource* (IEDB AR) dalam memprediksi kandidat peptida vaksin COVID untuk populasi Asia dengan *supertipe human leukocyte antigen* (HLA)-DR yang berbasis pada spike dari SARS-CoV-2 itu sendiri.

Vaksin peptida adalah vaksin yang tersusun dari beberapa residu asam amino, umumnya terdiri dari 9-15 residu (Indi, 2018). Asam amino merupakan monomer dari protein, sehingga protein adalah senyawa utama bahan dari kandidat vaksin peptide (Indi, 2018). Prinsip pengembangan vaksin peptida didasarkan pada respon sistem imun terhadap antigen. Ketika sistem imun akan mengaktifkan sel B, terjadi ikatan antara protein histokompatibilitas (*major histocompatibility complex*/MHC) dengan peptida antigen yang selanjutnya MHC tersebut akan berikatan dengan sel T *helper* sebelum sel B teraktivasi (Subroto et al, 2013). Protein MHC memiliki polimorfisme, hal ini yang mengakibatkan perbedaan protein MHC antar orang, baik orang dengan orang dalam satu negara maupun orang dengan orang berbeda negara (Nielsen et al, 2016; Hoffmann et al, 2017). Untuk mengembangkan

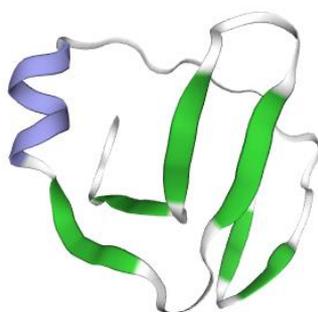
vaksin peptida bisa digunakan metode bioinformatika atau dalam istilah spesifik disebut imunoinformatika. Prinsip kerja imunoinformatika adalah memprediksi ikatan peptida dengan MHC. MHC memiliki polimorfisme yang sangat luas. Polimorfisme dapat dibagi berdasarkan wilayah, yaitu Asia, Eropa dan Afrika. Pada aplikasi imunoinformatika ditandai dengan kode yang khas (Vita et al, 2014). Peptida yang dihasilkan dari prediksi imunoinformatika tersebut berasal dari protein yang dikandung oleh virus/antigen, sehingga peptida hasil prediksi dapat dijadikan kandidat vaskin peptide Tujuan penelitian Prediksi Struktur Protein 3 Dimensi dan Vaksin peptide SARS COV2.

METODE

Metode Penelitian ini menggunakan software yaitu struktur tiga dimensi dengan menggunakan swissprot, penentuan peptide yang imunogenik sebagai kandidat vaksin peptide dengan menggunakan IEDB.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Pada penelitian ini didapatkan hasil struktur tiga dimensi protein SARS CoV2 dan peptide SARS CoV2 yang imunogenik berdasarkan sel B.



Gambar 1. Struktur tiga dimensi protein SARS CoV2 dengan menggunakan software swiss model

Tabel 1. Peptide SARS CoV2 yang imunogenik berdasarkan sel B dengan menggunakan software IEDB

No	Peptide	Posisi
1	GGLIRGTSTR	110-120
2	SRSKRRFAS	126-134
3	WPWLPSVHRPSS	246-257
4	TFNIGKEIHLQWGM	297-310
5	FHNQDYSTKGKE	319-330

Pendekatan docking in silico merupakan langkah yang dapat dianggap sebagai platform rasional untuk merancang vaksin terhadap terhadap parasit, bakteri maupun virus. Akan tetapi, kemampuan epitop yang dihasilkan dari penelitian ini sebagai kandidat vaksin hanya gambaran awal, perlu dianalisis lebih lanjut dalam studi laboratorium biologi molekuler dan berbeda dari tinjauan penelitian yang dilakukan Sarkar et al (2020) Seperti yang dilakukan Pourseif et al (2019) mendesain vaksin untuk penyakit anjing gila secara in silico, Susanty et al (2015) memprediksi adanya bagian epitop H1N1 yang ampuh melawan virus H1N1, Naseri et al (2020) merancang vaksin CadF berbasis epitop agar mampu berinteraksi dengan alel HLA-A 0101 dan HLA-DRB1 0101 sehingga mampu melawan bakteri *Campylobacter jejuni* penyebab campilobacteriosis. Bahkan Kathwate et al (2020) mendesain vaksin yang dari epitop BCR dan TCR efektif melawan virus SARS-CoV-2 jikalau diambil

dari protein SARS-CoV-2. Pendekatan bioinformatika tentunya dapat digunakan untuk prediksi, perbaikan dan validasi struktur tersier vaksin yang dirancang pada masa-masa yang akan datang.

KESIMPULAN

Dari hasil penelitian yang dilakukan didapatkan hasil struktur protein tiga dimensi SARS CoV2 dan didapatkan 5 peptide yang dapat dijadikan sebagai kandidat vaksin SARS CoV2.

UCAPAN TERIMAKASIH

Ucapan terimakasih kepada Mohammad Raihan Alamudi Institute yang telah memberikan dukungan dana terhadap penelitian ini.

DAFTAR PUSTAKA

- Adnan M, Khan S, Kazmi A, Bashir N, Siddique R. COVID-19 infection : Origin , transmission , and characteristics of human coronaviruses. *J Adv Res.* 2020;24:91-98. doi:10.1016/j.jare.2020.03.005
- Hoffmann T, Marion A, Antes I. DynaDom : structure-based prediction of T cell receptor inter-domain and T cell receptor-peptide-MHC (class I) association angles. *BMC Struct Biol.* 2017;17(1):1-19. doi:10.1186/s12900-016- 0071-7
- Indi NLP. Ulasan tentang Coronavirus : Sebagai Agen Penyakit pada Hewan dan Manusia. *Wartazoa.* 2020;30(1):1-14. doi:10.14334/wartazoa.v30i1.2469
- Joshi A, Chandra B, Mannan MA, Kaushik V. Epitope based vaccine prediction for SARS-COV-2 by deploying immunoinformatics approach. *Informatics Med Unlocked.* 2020;19(January):1-8. doi:10.1016/j.imu.2020.100338
- Kathwate GH. In Silico design and characterization of multiepitopes vaccine for SARS-CoV2 from its Spike proteins. *bioRxiv Prepr Serv Biol.* 2020;(Version 2):1-38.
- Naseri MM, Shams S, Naseri MM, Bakhshi B. In silico analysis of epitope - based CadF vaccine design against *Campylobacter jejuni*. *BMC Res Notes.* Published online 2020:1-6. doi:10.1186/s13104-020-05364-z
- Nielsen M, Andreatta M. NetMHCpan-3 . 0 ; improved prediction of binding to MHC class I molecules integrating information from multiple receptor and peptide length datasets. *Genome Med.* 2016;9:1-9. doi:10.1186/s13073-016-0288-x
- Pourseif MM, Yousefpour M, Aminianfar M, Moghaddam G. A multi-method and structure-based in silico vaccine designing against *Echinococcus granulosus* through investigating enolase protein. *Tabriz Univ Med Sci.* 2019;9(3):131-144. doi:10.15171/bi.2019.18
- Sarkar B, Ullah A, Araf Y, Shahedur M. Informatics in Medicine Unlocked Engineering a novel subunit vaccine against SARS-CoV-2 by exploring immunoinformatics approach. *Informatics Med Unlocked.* 2020;21(October):100478. doi:10.1016/j.imu.2020.100478
- Subroto T, Hardianto A, Kahari AA, Pradnjaparamita T. Sintesis Tiga Peptida Bergugus Pelindung sebagai Prekursor Komponen Vaksin Influenza Universal. *J Natur Indones.* 2013;15(2):84-91.
- Susanty. Prediksi Efektivitas Nteraksi Antara Antibodi Dan Vaksin H1n1 Melalui Metode Molecular Docking Secara In Silico. *Prosiding Semin Nas Sains dan Teknol 2015.* 2015;(November):1-14.

Alamudi, 2022. Prediksi Struktur Protein 3 Dimensi...

Vita R, Overton JA, Greenbaum JA, et al. The immune epitope database (IEDB) 3 . 0. *Nucleic Acids Res.* 2015;43(October 2014):405-412. doi:10.1093/nar/gku938