



Estudo *in silico* de epítomos de alérgenos presentes nas oleaginosas comestíveis e prospecção de peptídeos candidatos a imunoterapia baseada em peptídeos

Tatiana de Moraes Lodi ¹, Olga Lima Tavares Machado ¹,

Laboratório de Química e Função de Proteínas e Peptídeos – CBB – UENF, RJ, Brasil

A alergia alimentar é um problema global de saúde pública. Milhares de pessoas sofrem com as reações alérgicas desencadeadas pelo consumo das oleaginosas comestíveis, que contêm proteínas alergênicas pertencentes a classe albumina 2S. Os fármacos antialérgicos são utilizados apenas para reduzir os sintomas, e as imunoterapias com extratos são empregadas no tratamento da doença, porém, podem ocasionar reações graves aos pacientes por conter outras proteínas alergênicas. A ocorrência de reações cruzadas entre alérgenos de amendoim e mamona foi mostrado em pesquisas, e evidenciou-se que os epítomos ligantes de IgE dos principais alérgenos da mamona possuem dois resíduos de ácido glutâmico, que são essenciais para a interação com a IgE. Para minimizar os impactos na qualidade de vida dos pacientes é fundamental o desenvolvimento de tratamentos personalizados. Para isso torna-se necessário compreender os alérgenos e caracterizar os epítomos ligantes de IgE e de células B e T. Neste trabalho foi realizado um estudo *in silico* das estruturas dos alérgenos da classe das albuminas 2S presentes no amendoim, gergelim, nozes, castanha de caju, castanha do Brasil, avelã e pistache. As sequências proteicas dos alérgenos foram obtidas no banco de dados PDB. A predição do peptídeo sinal foi realizada no software Signal. As sequências proteicas sem os peptídeos sinais foram alinhadas no software Clustal Ômega e visualizadas no software Jalview, priorizando o alinhamento dos resíduos de cisteína, destacando o percentual de identidade entre os alérgenos. A avaliação das propriedades físico-químicas foi realizada através do software ProtParam demonstrando o baixo peso molecular dessas proteínas. A predição da estrutura secundária foi realizada pelo software PHD e foi observado uma maior frequência a estrutura do tipo α -hélice em todos os alérgenos, seguida da estrutura "random coil". Os epítomos de células B foram preditos utilizando os softwares Bepipred-IEDB, BcePred e BCPreds. Através do software NetMHCII foram preditos os epítomos de células T classificados ligantes e epítomos de células T classificados como fortes ligantes. Pretende-se prosseguir com a caracterização dos alérgenos e ensaios bioquímicos, com a meta de sintetizar moléculas híbridas de epítomos ligantes de IgE ou de epítomos de célula T, visando obter uma imunoterapia baseada em peptídeos com epítomos de célula T ou híbridos de epítomos de células B e T.

Instituição do Programa de IC, IT ou PG: Programa de Pós-graduação em Biociências e Biotecnologia – Centro de Biociências e Biotecnologia - UENF

Fomento da bolsa: FAPERJ, CAPES, CNPq, UENF