

**XU Congresso  
Fluminense  
de Iniciação  
Científica e Tecnológica**

**28<sup>o</sup>**

Encontro de  
Iniciação  
Científica  
da UENF

**20<sup>o</sup>**

Circuito de  
Iniciação  
Científica do  
IFFluminense

**16<sup>a</sup>**

Jornada de  
Iniciação  
Científica  
da UFF



**UIII Congresso  
Fluminense de  
Pós-Graduação**

**23<sup>a</sup>**

Mostra de  
Pós-Graduação  
da UENF

**8<sup>a</sup>**

Mostra de  
Pós-Graduação  
do IFFluminense

**8<sup>a</sup>**

Mostra de  
Pós-Graduação  
da UFF

## **Estudo *in silico* de epítomos de células B e T derivados de alérgenos de oleaginosas comestíveis para a prospecção de uma imunoterapia baseada em peptídeo para o tratamento de alergias alimentares**

*Tatiana de Moraes Lodi<sup>1</sup>, Olga Lima Tavares Machado<sup>1</sup>*

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

A alergia alimentar é uma reação adversa a um determinado tipo de alimento que envolve eventos imunológicos sendo considerada um problema de saúde pública. As oleaginosas comestíveis apresentam na sua composição proteínas alergênicas da classe das albuminas 2S. O tratamento farmacológico da alergia alimentar consiste no uso de antialérgicos, que apenas reduzem os sintomas da doença, e nas imunoterapias com extratos padronizados, que por conter outras proteínas alergênicas, podem ocasionar reações adversas. A ocorrência de reações cruzadas entre alérgenos de amendoim e mamona já foi descrita, 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 da alergia alimentar e contribuir com a qualidade de vida dos pacientes alérgicos é fundamental o desenvolvimento de novos tratamentos personalizados. Assim, torna-se necessário a compreensão dos alérgenos e a caracterização dos epítomos ligantes de IgE e de células B e T. Realizamos neste trabalho uma análise *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. Através do banco de dados PDB obtivemos as sequências proteicas dos alérgenos, que foram utilizadas para a predição do peptídeo sinal no software Signal. As sequências sem os peptídeos sinais foram alinhadas no software Clustal Ômega, priorizando o alinhamento dos resíduos de cisteína e destacando as regiões conservadas entre os alérgenos. As propriedades físico-químicas foram avaliadas no software ProtParam, que demonstrou proteínas de baixo peso molecular. A predição da estrutura secundária foi realizada pelo software PHD, observando-se uma maior frequência de estruturas do tipo  $\alpha$ -hélice em todos os alérgenos, seguida da estrutura "random coil". Através dos softwares Bepipred-IEDB, BcePred e BCPreds foram preditos os epítomos de células B. A predição de epítomos de células T foi realizada pelo software NetMHCII, classificando os epítomos como ligantes e forte ligantes, e posteriormente selecionados para construção do peptídeo híbrido de células T. A predição de antigenicidade do peptídeo híbrido de células T foi realizada pelo software *Predicted Antigenic Peptides*, para prosseguir com sua síntese. De posse do peptídeo híbrido sintético, ensaios *in vivo* e *in vitro* de proliferação de células T, e avaliação do perfil de citocinas estão sendo realizados, visando obter uma imunoterapia baseada em peptídeos híbridos de epítomos de células T.

*Programa de pós-graduação em Biociências e Biotecnologia – CBB – UENF.*

ORGANIZAÇÃO E REALIZAÇÃO:



APOIO:



**XU** Congresso  
Fluminense  
de Iniciação  
Científica e Tecnológica

**28°**

Encontro de  
Iniciação  
Científica  
da UENF

**20°**

Circuito de  
Iniciação  
Científica do  
IFFluminense

**16°**

Jornada de  
Iniciação  
Científica  
da UFF



**UIII** Congresso  
Fluminense de  
Pós-Graduação

**23ª**

Mostra de  
Pós-Graduação  
da UENF

**8ª**

Mostra de  
Pós-Graduação  
do IFFluminense

**8ª**

Mostra de  
Pós-Graduação  
da UFF

## In silico study of B and T cell epitopes derived from edible oilseed allergens for the prospect of a peptide-based immunotherapy for the treatment of food allergies

Tatiana de Moraes Lodi <sup>1</sup>, Olga Lima Tavares Machado <sup>1</sup>

Laboratory of Chemistry and Function of Proteins and Peptides – CBB – UENF, RJ, Brazil

Food allergy is an adverse reaction to a particular type of food that involves immunological events and is considered a public health problem. Edible oilseeds have in their composition allergenic proteins of the 2S albumin class. The pharmacological treatment of food allergy consists of the use of anti-allergic drugs, which only reduce the symptoms of the disease, and immunotherapies with standardized extracts, which, because they contain other allergenic proteins, can cause adverse reactions. The occurrence of cross reactions between peanut and castor bean allergens has already been described, and it was shown that the IgE binding epitopes of the main castor bean allergens have two residues of glutamic acid, which are essential for the interaction with IgE. To minimize the impacts of food allergy and contribute to the quality of life of allergic patients, it is essential to develop new personalized treatments. Thus, it becomes necessary to understand allergens and characterize the binding epitopes of IgE and B and T cells. of cashew, Brazil nut, hazelnut and pistachio. Through the PDB database, we obtained the protein sequences of the allergens, which were used to predict the signal peptide in the Signal software. Sequences without signal peptides were aligned using the Clustal Omega software, prioritizing the alignment of cysteine residues and highlighting conserved regions among allergens. The physicochemical properties were evaluated using the ProtParam software, which demonstrated low molecular weight proteins. Secondary structure prediction was performed using the PHD software, observing a higher frequency of  $\alpha$ -helix structures in all allergens, followed by the “random coil” structure. B cell epitopes were predicted using the Bepipred-IEDB, BcePred and BCPreds software. The antigenicity prediction of the T cell hybrid peptide was performed by the Predicted Antigenic Peptides software, to proceed with its synthesis. In possession of the synthetic hybrid peptide, *in vivo* and *in vitro* assays of T cell proliferation, and evaluation of the cytokine profile are being carried out, aiming to obtain an immunotherapy based on hybrid peptides of T cell epitopes.

Graduate Program in Biosciences and Biotechnology – CBB – UENF.

ORGANIZAÇÃO E REALIZAÇÃO:



APOIO:

