



## Predição *in silico* de epitopos de alérgenos presentes nas oleaginosas comestíveis através de ferramentas de bioinformática

Tatiana de Moraes Lodi, Olga Lima Tavares Machado

A alergia alimentar afeta milhares de pessoas. Dentre os alimentos que desencadeiam reações alérgicas, destacam-se as oleaginosas, que contêm proteínas alergênicas pertencentes a classe albumina 2S. Os tratamentos farmacológicos empregam os antialérgicos, que apenas diminuem os sintomas, e as imunoterapias com extratos, que podem ocasionar reações graves. Pesquisas demonstram a ocorrência de reações cruzadas entre alérgenos de amendoim e mamona. Foi evidenciado que os epitopos ligantes de IgE da mamona (Ric c 1 e Ric c 3) possuem 2 resíduos de ácido glutâmico que são essenciais para a interagir com a IgE. A compreensão dos alérgenos, caracterização dos epitopos ligantes de IgE e de células B e T, e o desenvolvimento de tratamentos são fundamentais para a medicina de precisão, que propõe o um tratamento personalizado. A proposta deste trabalho é realizar um estudo "*in silico*" das estruturas de alérgenos da classe das albuminas 2S presentes no amendoim, gergelim, nozes, castanha de caju, castanha do Brasil, avelã e pistache. O levantamento das estruturas dos alérgenos foi realizado nos bancos de dados NCBI, Uniprot e PDB. As sequências proteicas foram alinhadas no software Clustal Ômega, levando em conta a conservação dos resíduos de cisteína. Foi demonstrado no alinhamento a conservação de aminoácidos dicarboxílicos. Na análise de bioinformática foram preditos epitopos de células B utilizando os softwares Bepipred-IEDB, BcePred e BCPreds. Através do software NetMHCII foram preditos os epitopos de células T e classificados como ligantes 21 epitopos de Ara h 6 e 60 de Ara h 2 (amendoim), 93 de Ber e 1 (castanha do Brasil), 76 de Ana o 3 (castanha de caju), 81 de Pis v 1 (pistache), 83 de Cor a 14 (avelã), 119 de Jug r 1 (Noz) e 65 de Ses i 1 (gergelim). Destes, foram classificados como fortes ligantes 14 epitopos de Ara h 2, 33 de Ber e 1, 11 de Ana o 3, 28 de Pis v 1, 10 de Cor a 14, 27 de Jug r 1 e 25 de Ses i 1. Para o alérgeno Ara h 6 não foi predito nenhum epitopo de forte ligação. As estruturas secundárias dos alérgenos foram preditas pelo software PHD e foi avaliado com maior frequência a estrutura em  $\alpha$ -hélice em todos os alérgenos, seguida da estrutura randômica, e com uma frequência mais baixa da fita estendida nos alérgenos de Ses i 1, Ana o 3, Pis v 1, Cor a 14 e Jug r 1. Pretende-se prosseguir com a caracterização dos alérgenos e ensaios bioquímicos, com a meta de sintetizar moléculas híbridas de epitopos ligantes de IgE ou de epitopos de célula T, visando obter duas abordagens de tratamentos, uma com o bloqueio de IgE com peptídeos e uma imunoterapia com epitopos de célula T ou híbridos de epitopos de células B e T.

Palavras-chave: Albumina 2S, Alergia alimentar, Bioinformática, Epitopo, Oleaginosas comestíveis.

Financiamentos: CAPES, CNPq, FAPERJ