

Análisis in silico de cit s 2: una profilina altamente conservada

Velky Ahumada,^{1,2} Nayelys Peña,¹ Nestor Herrera,¹ Juan Urrego¹

¹Grupo de Investigación Tecnosalud. Escuela de Ciencias de la Salud, ECISA, Universidad Nacional Abierta y a Distancia (UNAD), Cartagena, Colombia

²Grupo de Investigación de Tecnología Farmacéutica, Cosmética y de Alimentos. Universidad de Cartagena. Cartagena, Colombia

Correspondencia:

Juan Urrego
jurregoa1@unicartagena.edu.co
Velky Ahumada
vahumadac@unicartagena.edu.co

Rev Alerg Mex 2024; 71 (1): 78

<https://doi.org/10.29262/ram.v71i1.1359>

Resumen

Objetivo: Analizar las relaciones filogenéticas y el mimetismo molecular de Cit s 2 y otras profilinas vegetales.

Métodos: Se utilizaron herramientas bioinformáticas en línea, incluida la de búsqueda de alineación local básica (BLASTP), PRALINE y MEGA, para alineamientos múltiples y análisis filogenético. Se predijo un modelo de homología 3D de Cit s 2. Los modelos se calcularon con MODELLER. El mejor modelo fue seleccionado con la opción de puntuación de modelo de Maestro. Las regiones conservadas entre Cit s 2 y otras profilinas se ubicaron en el modelo 3D y las regiones antigénicas fueron predichas por el servidor ElliPro (3-5).

Resultados: La secuencia de aminoácidos de Cit s 2 (código Uniprot: P84177), se comparó con otras 30 profilinas de diferentes fuentes alergénicas. La mayor identidad se observó con *Cucumis melo* (99%) seguida de *Prunus persica* (98%) y *Malus domestica* (92%). Se observaron regiones antigénicas altamente conservadas en el modelo predicho en 3D. Se encontraron siete epítopos lineales, y seis epítopos discontinuos en Cit s 2.

Conclusión: Se observaron regiones antigénicas altamente conservadas en el modelo 3D predicho de Cit s 2, lo que podría implicar una posible reactividad cruzada entre Cit s 2 y otras profilinas. Se necesitan estudios futuros para analizar más a fondo estos resultados.

Palabras clave: Alérgenos; Naranja; Alineamiento; Profilinas; Bioinformática.

Abstract

Objective: Analyze phylogenetic relationships and molecular mimicry of Cit s 2 and other plant profilins.

Methods: Online bioinformatics tools including Basic Local Alignment Search Tool (BLASTP), PRALINE and MEGA were used for multiple alignments and phylogenetic analysis. A 3D-homology model of Cit s 2 was predicted. Models were calculated with MODELLER. The best model was selected with the model scoring option of MAESTRO. Conserved regions between Cit s 2 and other profilins were located on the 3D model and antigenic regions were predicted by ElliPro server (3-5).

Results: Cit s 2 amino acid sequence (Uniprot code:P84177) was compared with other 30 profilins from different allergenic sources. The identity between Cit s 2 and other profilins ranged between 82 and 99%. The highest identity was observed with *Cucumis melo* (99%) followed by *Prunus persica* (98%) and *Malus domestica* (92%). High conserved antigenic regions were observed on the 3D predicted model. Seven lineal and six discontinuous epitopes were found in Cit s 2.

Conclusion: High conserved antigenic regions were observed on the 3D predicted model of Cit s 2, which might involve potential cross-reactivity between Cit s 2 and other profilins. Future studies are needed to further analyze these results.

Keywords: Allergen; Orange; Alignment; Profilins; Bioinformatic.