


Análisis en silico del mimetismo molecular entre acuaporina 3 humana y *Aspergillus fumigatus*: implicaciones para el potencial de reactividad cruzada

Andrés Sánchez,^{1,2,3}  Yaquelin Padilla,¹ Adriana Lorduy,¹ Jorge Sánchez,² Marlon Múnera,³ Claudia Baena,¹ Carlos Bernal,¹ Juan Urrego¹

¹Research Group of Pharmaceutical, Cosmetic and Food Technology. University of Cartagena, Cartagena, Colombia

²Group of Clinical and Experimental Allergy. University of Antioquia, Medellín, Colombia

³Group of Research Medicine. Rafael Núñez University Corporation. Cartagena, Colombia

Correspondencia:

Andrés Sánchez
andres.sanchez@curnvirtual.edu.co

Rev Alerg Mex 2024; 71 (1): 56

<https://doi.org/10.29262/ram.v71i1.1370>

Resumen

Objetivo: Realizar una evaluación *in silico* del posible mimetismo molecular entre las acuaporinas humanas, *A. fumigatus* y diversas fuentes alérgicas.

Métodos: Se compararon secuencias de aminoácidos de AQP3 humana y acuaporina de *A. fumigatus* mediante alineamientos múltiples con 25 acuaporinas de diversas fuentes alérgicas. Se ejecutaron análisis filogenéticos y modelos basados en homología, y el servidor ElliPro predijo regiones antigénicas preservadas en estructuras 3D.

Resultados: La identidad global entre las acuaporinas estudiadas fue del 32.6%, con una región local específica preservada en el 71.4%. Se formaron cinco clados monofiléticos (A-E), y el grupo B mostró la identidad más alta (95%), incluidas 6 acuaporinas de mamíferos, en particular AQP3. *A. fumigatus* acuaporin exhibió la mayor identidad con *Malassezia sympodialis* (35%). Se identificaron tres epítopos lineales y tres discontinuos en acuaporinas tanto humanas como de *A. fumigatus*. La desviación cuadrática media (RMSD) de las estructuras de acuaporinas superpuestas fue de 1,006.

Conclusión: La identificación de posibles epítopos lineales y conformacionales en AQP3 humano sugiere un probable mimetismo molecular con acuaporinas de *A. fumigatus*. La identidad alta en una región antigénica específica indica autorreactividad potencial y un sitio antigénico probable implicado en la reactividad cruzada. La validación mediante estudios *in vitro* e *in vivo* es decisivo para una mayor comprensión y confirmación.

Palabras clave: Dermatitis atópica; *In silico*; Mimetismo molecular; *Aspergillus fumigatus*; Acuaporinas.

Abstract

Objective: Conduct an in-silico assessment of potential molecular mimicry between human aquaporins, *A. fumigatus*, and diverse allergenic sources.

Methods: Amino acid sequences of human AQP3 and *A. fumigatus* aquaporin were compared through multiple alignments with 25 aquaporins from diverse allergenic sources. Phylogenetic analysis and homology-based modeling were executed, and the ElliPro server predicted conserved antigenic regions on 3D structures.

Results: Global identity among studied aquaporins was 32.6%, with a specific conserved local region at 71.4%. Five monophyletic clades (A-E) were formed, and Group B displayed the highest identity (95%), including 6 mammalian aquaporins, notably AQP3. *A. fumigatus* aquaporin exhibited the highest identity with *Malassezia sympodialis* (35%). Three linear and three discontinuous epitopes were identified in both human and *A. fumigatus* aquaporins. The Root Mean Square Deviation (RMSD) from overlapping aquaporin structures was 1.006.

Conclusion: Identification of potential linear and conformational epitopes on human AQP3 suggests likely molecular mimicry with *A. fumigatus* aquaporins. High identity in a specific antigenic region indicates potential autoreactivity and a probable antigenic site involved in cross-reactivity. Validation through in vitro and in vivo studies is essential for further understanding and confirmation.

Keywords: Atopic dermatitis; In silico; Molecular mimicry; *Aspergillus fumigatus*; Aquaporins.