

## Análisis *in silico* del mimetismo molecular entre Der p 23 contra fuentes alérgicas

Andrés Sánchez-Caraballo,<sup>1,2,3</sup> Valentina García-Solano,<sup>1</sup> Sonia Karina González-Rangel,<sup>1</sup> Valeria Grattz-Lamadrid,<sup>1</sup> Marlon Múnera-Gomez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Salud, Grupo de Investigación Médica (GINUMED), Corporación Universitaria Rafael Nuñez, Cartagena, Colombia

<sup>2</sup>Grupo de Alergia Clínica y Experimental (GACE), IPS Universitaria, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia

<sup>3</sup>Grupo de investigación en Farmacéutica, Cosmética y Tecnología de Alimentos (GIFTCA), Universidad de Cartagena, Bolívar, Colombia

### Correspondencia:

Andrés Sánchez  
andres.sanchez@curnvirtual.edu.co

Rev Alerg Mex 2024; 71 (1): 67

<https://doi.org/10.29262/ram.v71i1.1377>

### Resumen

**Objetivo:** Identificar, a través de análisis *In Silico*, el posible mimetismo molecular entre Der p 23 y antígenos de fuentes alérgicas.

**Métodos:** Se buscó identidad entre Der p 23 y proteínas de las familias de ácaros Pyroglyphidae, Acaridae, Chortoglyphidae y Echimyopodidae, a través de PSI-BLAST, y se utilizaron PRALINE y EMBOSS para los alineamientos. Los antígenos con estructura experimental resuelta se obtuvieron de Protein Data Bank, y aquellos no informados, se generaron mediante Swiss Model Server y ALPHAFOLD 2. La predicción de epítopes se realizó con el servidor Ellipro y para la visualización de los modelos en 3D, se utilizó Pymol 2.3.

**Resultados:** El análisis entre alérgenos de Pyroglyphidae y Der p 23, mostró identidad con la proteína parecida a endoquitinasa de *D. pteronyssinus*, y el dominio de unión a quitina tipo 2 de *D. farinae*, con identidades entre 85 y 100%, con coberturas de 100% y 75%, respectivamente. Los alérgenos Der f 23 y Der p 23 de *D. farinae* y *D. pteronyssinus*, tuvieron una cobertura del 100% con identidades del 85,42% y 79,59%, respectivamente. Entre los alérgenos de *Tyrophagus putrescentiae*, se incluyeron la unión a quitina, glicoproteína específica del oviducto y Cda4p, las cuales tuvieron valores de identidad correspondientes al 40%, 42,22% y 34,78%, con valores de cobertura que no superan el 55%. No se encontraron resultados para Chortoglyphidae y Echimyopodidae.

**Conclusión:** Existe mimetismo molecular y homología estructural entre Der P 23 y alérgenos de fuentes alérgicas de las familias Pyroglyphidae y Acaridae. Se identificaron potenciales epítopes en Der p 23, los cuales podrían presentar reactividad cruzada con las proteínas de las fuentes alérgicas estudiadas, lo cual debe ser demostrado en estudios *In Vitro* e *In Vivo*. Se necesitan trabajos *In Vitro* e *In Vivo* que demuestren los resultados obtenidos en el análisis *In Silico*.

**Palabras clave:** Alergia; Mimetismo molecular; Ácaro; Der p 23; Bioinformática.

### Abstract

**Objective:** To identify through *In Silico* analysis the possible molecular mimicry between Der p 23 and antigens from allergenic sources.

**Methods:** Identity was sought between Der p 23 and proteins from the mite families Pyroglyphidae, Acaridae, Chortoglyphidae and Echimyopodidae, through PSI-BLAST and They used PRALINE and EMBOSS for the alignments. Antigens with resolved experimental structure were obtained from Protein Data Bank and those not reported were generated using Swiss Model server and ALPHAFOLD 2. Epitope prediction was carried out with the Ellipro server and Pymol 2.3 was used to visualize the 3D models.

**Results:** The analysis between Pyroglyphidae allergens and Der p 23 showed identity with the endochitinase-like protein of *D. pteronyssinus*, and the type 2 chitin binding domain of *D. farinae*, with identities between 85 and 100%, with coverage of 100%, and 75% respectively. The allergens Der f 23 and Der p 23 of *D. farinae* and *D. pteronyssinus* had 100% coverage with identities of 85.42% and 79.59%, respectively. Among the allergens of *Tyrophagus putrescentiae*, binding to chitin, oviduct-specific glycoprotein and Cda4p were included, which had identity values corresponding to 40%, 42.22% and 34.78%, with coverage values that did not exceed the 55%. No results were found for Chortoglyphidae and Echimyopodidae.

**Conclusion:** There is molecular mimicry and structural homology between Der P 23 and allergens from allergic sources of the Pyroglyphidae and Acaridae families. Potential epitopes were identified in Der p 23, which could present cross-reactivity with the proteins of the allergenic sources studied, which must be demonstrated in *In vitro* and *In vivo* studies. *In vitro* and *in vivo* work is needed to demonstrate the results obtained in the *In Silico* analysis.

**Keywords:** Allergy; Molecular mimicry; Mite; Der p 23; Bioinformatics.