



ANÁLISE *IN SILICO* DA ESTRUTURA TRIDIMENSIONAL DE RUBERITRINA DE *Entamoeba histolytica* (ENTAMOEBIDAE) E LOCALIZAÇÃO DE EPÍTOPOS IMUNODOMINANTES PARA FINS VACINAIS

Nathâny Fernandes Biela¹, Arlindo Gomes de Macêdo Junior^{2*}.

¹Universidade Federal de Uberlândia - UFU.

²Universidade Federal do Goiás - UFG.

*agmacedojr@gmail.com

Recebido em: 01/09/2014 – Aprovado em: 19/09/2014 – Publicado em: 24/09/2014

Entamoeba histolytica é o agente etiológico da amebíase, um problema de saúde pública responsável por mais de 100.000 mortes anuais. Sua forma assintomática manifesta-se em 90% dos pacientes infectados e os demais 10% podem apresentar colites e abscessos extraintestinais. Estudos de prevenção a amebíase com formulações vacinais são realizados por diferentes pesquisadores, entretanto, nenhuma vacina tem sido testada em humanos ainda. Encontra-se na literatura diferentes pesquisas proteômicas de *E. histolytica*, que todavia, abarcam escassas informações sobre a conformação estrutural de tais antígenos ou sobre a localização de epítomos imunodominantes em suas estruturas tridimensionais. A Rubreritrina (Rbr), constituinte do conjunto de proteínas mitossomais em *E. histolytica* e outras diversas bactérias anaeróbicas, mostrou-se presente por ensaios de imunofluorescência na porção intracelular e na superfície de trofozoítos desse protozoário. A Rbr possui como característica um centro reativo de Fe-S e desempenha um papel oxiredutor dependente de NADPH. Diante do exposto, objetivamos realizar a predição da estrutura tridimensional e de epítomos imunodominantes da Rubreritrina (XP_652131) de *E. histolytica* por meio de análise de sequência de aminoácidos *in silico*. Para tal finalidade, a predição de sua estrutura tridimensional foi realizada por I-Tasser e os epítomos imunodominantes para células T foram obtidas frente aos alelos de MHC I e II (*IEDB Analyses Resource*) com maiores frequências na população (*The Allele Frequency Net Database*). Para predição de epítomo de célula B foram utilizados os critérios de melhor acessibilidade, antigenicidade, linearidade e flexibilidade (*IEDB Analyses Resource*). O modelo tridimensional obtido apresentou parâmetros de confiabilidade com valores de C-score 1,10, TM-score 0,86 ($\pm 0,07$) e RMSD 3,0 ($\pm 2,2$ Angstrom) e predominância em sua estrutura de domínios alfa hélice ($n=5$). A predição de epítomos de célula B e T revelou dois peptídios, compostos de 11 aminoácidos cada, com melhor possibilidade de utilização com fins vacinais. Protocolos de vacinação com os dois peptídeos preditos, caracterizam a possibilidade de aproximadamente 72% e 96% de cobertura com alelos de MHC I e MHC II mais frequentes da população mundial, respectivamente. Quando considerado a possibilidade de cobertura populacional com a utilização de vacinas desses peptídeos preditos na

América do Sul, observa-se valores de 45,91% e 99,7% para alelos de MHC I e MHC II, respectivamente. Desta forma, acreditamos que o mapeamento *in silico* realizado sugere a possível utilização dos dois peptídeos imunodominantes em protocolos de formulações vacinais com estimulação da resposta imune celular e humoral, favorecendo assim, a prevenção à amebíase.

PALAVRAS- CHAVE: *Entamoeba histolytica*, *in silico*, Ruberitrina, vacina.