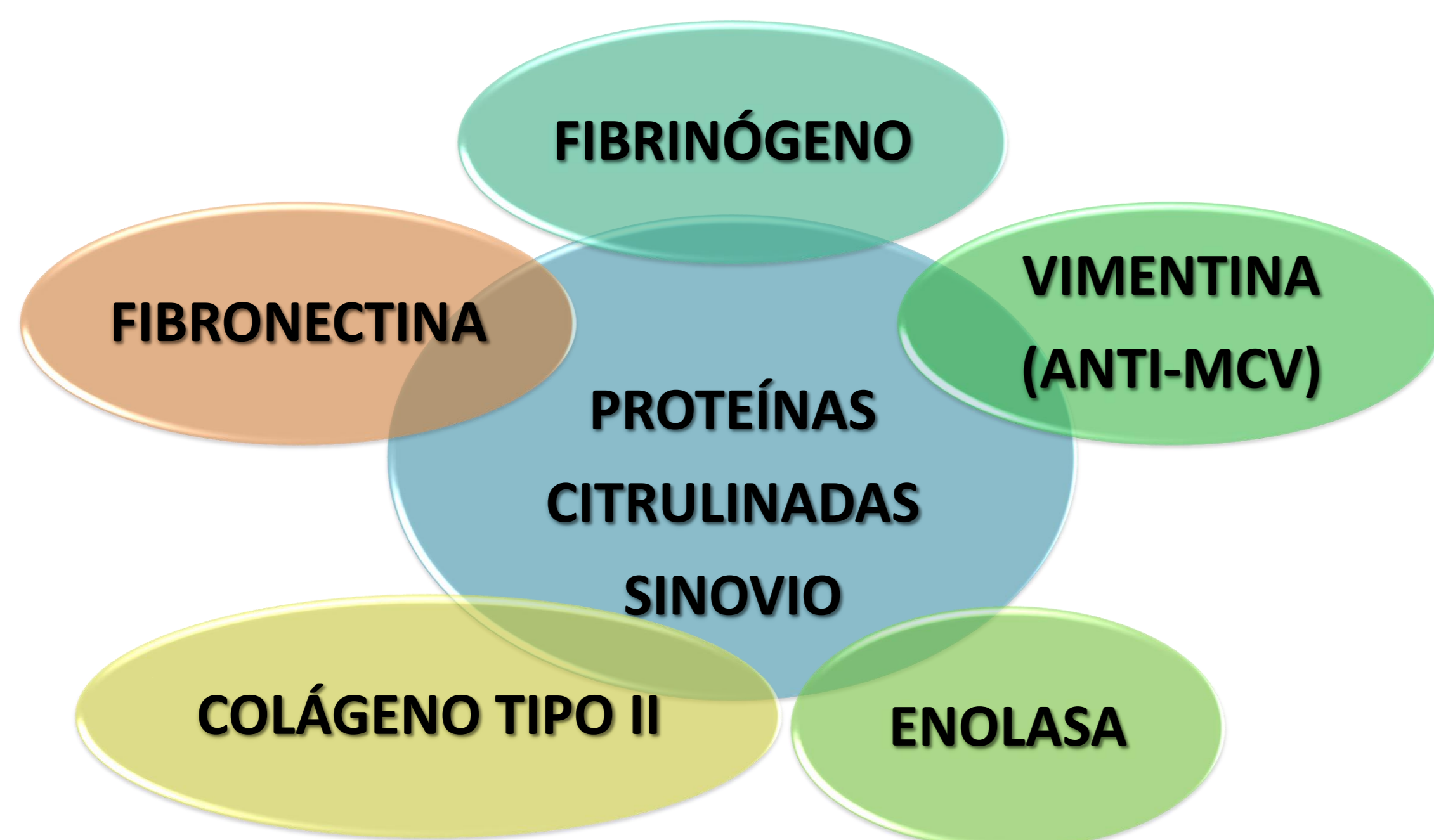


Aplicación de predicción informática de epítomos de células B y requerimientos estructurales al fibrinógeno

Autores: Goitybell Martínez Téllez^I. Hilda Elisa Garay Pérez^{II}. Vicky Sánchez Rodríguez^I. Bárbara Torres Rives^I.

Introducción

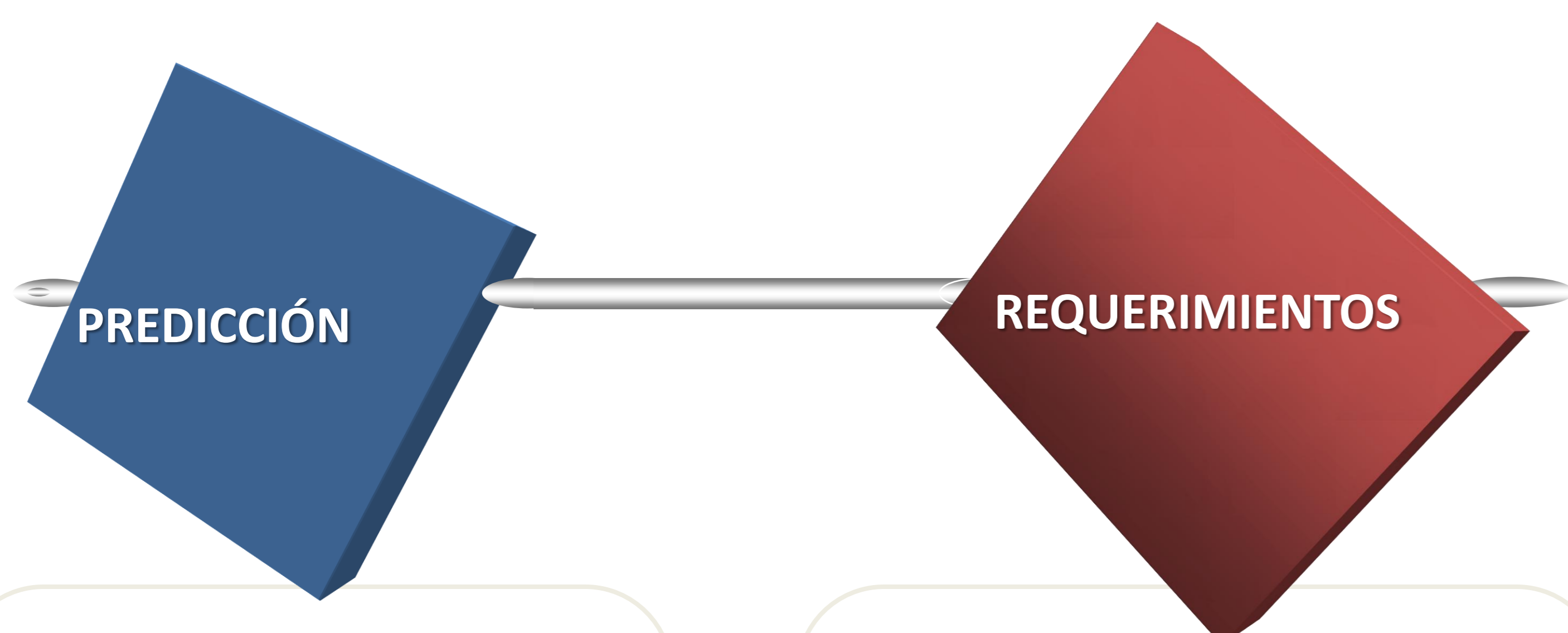
ANTÍGENOS DIANAS DESENCADENANTES DE LA AUTOINMUNIDAD EN LA AR



Objetivo

El objetivo de este trabajo fue realizar la predicción de epítomos de células B del fibrinógeno mediante la aplicación de programas informáticos y de requerimientos estructurales para la citrulinación.

Métodos



- Fibrinógeno (Cadenas de α y β)
- Programas informáticos
- Discotop 1.2
- BepiPred 1.0

- Cys de unión y Cys final
- Carboxamida terminal
- Citrulinación en 2 Arg
- Carga +
- Balance Arg/Citr

Resultados

EPÍTOMOS CON MAYOR CANTIDAD DE AMINOÁCIDOS COINCIDENTES POR AMBOS PROGRAMAS INFORMÁTICOS

Cadena del fibrinógeno	Programa informático	
	BepiPred 1.0 (Lineal)	Discotop 1.2 (Conformacional)
α Fibrinógeno	26-48, 59-61, 78-85, 98-110, 175-184, 194-199, 210-232	30-39, 60-68, 70-89, 96-117, 174-177, 193-210
β Fibrinógeno	16-69, 91-102, 105-113, 129-141, 143-146, 156-162, 216-222, 230-234, 243-250, 254-288, 304-305, 316-324, 330-337, 345-354, 359-362, 402, 408-419, 427-434	55, 90-99, 110, 123-142, 144-149, 158-159, 221, 231-234, 243-246, 256-257, 304-306, 315-322, 332-337, 348, 359-364, 378-377-381, 384-392, 396-397, 417-425, 429-431

PÉPTIDO SELECCIONADO

KDLLPSCitDRQH C GHCitPLDKKREE C

α 210-220 β 45-55

- Carga positiva: 3 +
- Balance Arg/Cit: 2/2
- Aminoácidos permisibles: Glicina, serina, histidina, treonina y glutamina

Conclusiones

La predicción mediante programas informáticos y aplicación de requerimientos estructurales para la citrulinación, es una metodología que puede ser aplicada a la predicción de epítomos de células B del fibrinógeno para el desarrollo de inmunoensayos.

APORTE ECONÓMICO

Representa un ahorro importante de divisas (aproximadamente 1250 CUC) con respecto a la estrategia de mapeo de epítomos mediante péptidos sobrelapantes, que conllevaría a la síntesis y caracterización de 71 péptidos con longitud de 15 aminoácidos.