



IDENTIFICAÇÃO DE ALVOS PARA ANTICORPOS ANTI-SARS-COV-2 E DESIGN RACIONAL COM ÊNFASE NAS VARIANTES DE ESCAPE: APLICAÇÕES PARA OTIMIZAÇÃO DE VACINAS E IMUNIZANTES

Natália Raquel Silva Oliveira¹, Rafael Trindade Maia²

RESUMO

A pandemia ocasionada pelo agente etiológico da COVID-19, o SARS-CoV-2, decretada desde 11 de março de 2020 continua sendo um dos grandes problemas de saúde pública no mundo inteiro. A imunização através da vacina é uma das principais estratégias de enfrentamento da doença, no entanto, a rápida dispersão do vírus contribuiu para o surgimento de variantes de escape do SARS-CoV-2, que são novas linhagens do vírus que apresentam potencial de escape à resposta imunológica devido a mutações nos epítomos específicos (pequenas regiões da proteína que servem de alvos para anticorpos) principalmente da proteína Spike, que é a proteína viral responsável pelo reconhecimento das células do hospedeiro humano. Assim, a presente pesquisa tem como objetivo identificar epítomos específicos nas proteínas Spike das variantes de escape do novo coronavírus com o intuito de se fornecer informação e modelos antigênicos que sirvam para futura otimização das composições das atuais vacinas. Para isto, a metodologia utilizada pela pesquisa foi a mineração de dados em bases disponíveis de sequências e estruturas da proteína Spike, que foram analisadas por alinhamento, estrutura e composição peptídica para identificar e modelar novos epítomos promissores para alvos de novos anticorpos. As variantes do SARS-CoV-2 selecionadas pela pesquisa foram a Ômicron e Delta, e por meio da análise das propriedades físico-químicas da sequência da proteína Spike dessas variantes foi possível selecionar quatro epítomos antigênicos, que foram modelados e validados evidenciando que estes podem ser potenciais alvos de anticorpos podendo auxiliar no desenvolvimento e otimização de vacinas e imunizantes.

Palavras-chave: COVID-19, Modelagem molecular, desenvolvimento de vacinas.

¹ Aluna de Bacharelado em Farmácia, Unidade Acadêmica de Saúde, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: raquelnatalia56@gmail.com

² Professor Doutor, do Curso de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, Licenciatura em Educação do Campo, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: rafael.rafatrin@gmail.com

***TARGET IDENTIFICATION FOR ANTI-SARS-COV-2 ANTIBODIES AND
RATIONAL DESIGN WITH EMPHASIS ON ESCAPE VARIANTS: APPLICATIONS
FOR VACCINE AND IMMUNIZATION OPTIMIZATION***

ABSTRACT

The pandemic caused by the etiological agent of covid-19, sars-cov-2, decreed since march 11, 2020, remains one of the major public health problems worldwide. Immunization through one of the main disease coping strategies, however, is the spread of the variant-derived virus of new virus variants that have escape potential for sars-cov-2, which are escape variants of the new variants of viruses that have the potential to escape to the new variants of the virus due to a recognition of the protein in the targets and in the target regions of the protein mainly, which is a viral response responsible for the cells of the human host. Thus, the research has to identify epitopes presented as specifics of specific vaccines in the Spike proteins of the escape variants of the new coronavirus in order to provide information and antigenic models that serve to optimize the compositions of the currents. For this, a methodology used was the search following a data mining in available bases of Spike protein structures, which were composed by new ones, to identify and model and promissory notes for targets of new and new structures. As SARS-CoV-2 variants selected by the research to Ômicron and Delta, and through the analysis of the physicochemical properties of the Spike sequence, variants of the protein were derived possible to select four and antigens, which were modeled and validated, showing that these may be potential targets of products that can assist in the development and optimization of vaccines and immunizations.

Keywords: COVID-19, Molecular modeling, vaccine development.