



4to COLOQUIO EN BIOCENCIAS, 2024

PREDICCIÓN *IN SILICO* DE EPÍTOPOS CON POTENCIAL INMUNOGÉNICO EN EL PROTEOMA DE *LEISHMANIA MEXICANA*

Pérez Concepción Isis, Bouza Figueroa Jesús, Tejeda Mansir Armando. Departamento de Investigaciones Científicas y Tecnológicas, Universidad de Sonora, México. a221230212@unison.mx

Resumen

La leishmaniasis cutánea causada por *Leishmania mexicana* representa un problema de salud pública en México, país en el que cada año se reportan nuevos casos de la enfermedad. La prevención de la leishmaniasis está limitada por la carencia de vacunas protectoras para uso humano, lo que promueve la búsqueda de alternativas para controlar el parásito. Entre estas, los métodos computacionales ofrecen oportunidades para identificar nuevos antígenos vacunales contra *L. mexicana*. Este estudio se enfoca en predecir epítomos inmunogénicos en el proteoma del parásito mediante herramientas inmunoinformáticas. El proteoma de *L. mexicana* U1103 se obtuvo de la base de datos RefSeq y se analizó *in silico* mediante un cribado secuencial, a través de los programas VaxiJen v2.0, TMHMM, TOPCONS, BLASTp, AlgPred 2, SecretomeP 2.0, DeepLoc 2.0, CELLO v2.5 y ProtParam. La predicción antigénica resultó en la identificación de 55 proteínas estables, no homólogas con el proteoma humano, conservadas a nivel de especie y en su mayoría clasificadas como hipotéticas. De este conjunto de antígenos, se predijeron 83 epítomos de unión fuerte a receptores de células B y T utilizando la base de datos IEDB, y los programas NetMHCpan (I y II), IFNepitope y BepiPred 3.0. De las secuencias identificadas, 12 epítomos destacaron por su antigenicidad, promiscuidad e inmunogenicidad para alelos de Antígenos Leucocitarios Humanos prevalentes en la población mexicana, con una cobertura poblacional superior al 80% según IEDB. El análisis computacional realizado en este estudio permitió la identificación de péptidos que podrían tener un impacto significativo en la respuesta inmune protectora frente a la leishmaniasis cutánea. Los epítomos seleccionados muestran un alto potencial para ser incluidos en una vacuna profiláctica contra *L. mexicana*.



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



**IN SILICO PREDICTION OF EPITOPES WITH IMMUNOGENETIC POTENTIAL IN
THE LEISHMANIA MEXICANA PROTEOME**

Abstract

Cutaneous leishmaniasis caused by *Leishmania mexicana* represents a health concern in Mexico, where more cases of the disease are reported each year. The prevention of leishmaniasis is limited by the lack of a vaccine for human use, which stimulates the search for alternative methods to control the parasite. Among these, computational approaches offer an opportunity for the discovery of new vaccine antigens against *L. mexicana*. This study focuses on predicting immunogenic epitopes in the parasite's proteome using immunoinformatics tools. The proteome of *L. mexicana* U1103 was retrieved from RefSeq database and analyzed *in silico* through an in-house developed methodology involving VaxiJen v2.0, TMHMM, TOPCONS, BLASTp, AlgPred 2, SecretomeP 2.0, DeepLoc 2.0, CELLO v2.5 and ProtParam tools. We identified 55 stable antigens, non-homologous to the human proteome, most of which were hypothetical proteins. From the selected antigens set, a total of 83 B and T-cell epitopes were predicted using the IEDB database, along with NetMHCpan (I and II), IFNepitope, and BepiPred 3.0 softwares. Among the identified sequences, 12 epitopes stood out for their antigenicity, promiscuity, and immunogenicity for prevalent Human Leukocyte Antigens alleles in the Mexican population, with a predicted IEDB population coverage above 80%. In conclusion, the computational analysis carried out in this study enabled the identification of peptides that could significantly influence the immune response during cutaneous leishmaniasis, and that show high potential for its inclusion in a protective vaccine against *L. mexicana*.



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"

